

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

**DESARROLLO Y APLICACIÓN DE MÉTODOS
COMPUTACIONALES DE AVANZADA PARA EL
CÁLCULO DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE
MATERIALES CORRELACIONADOS**

Yuriel Núñez Fernández

Doctorando

Dra. Karen Hallberg

Director

Miembros del Jurado

Dr. Armando Aligia (Instituto Balseiro)

Dr. Pablo Roura Bas (Centro Atómico Bariloche)

Dra. Verónica Vildosola (Centro Atómico Constituyentes)

27 de Marzo de 2018

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

Índice de símbolos

| | |
|--------------|---|
| ED | Diagonalización Exacta para un hamiltoniano de fermiones. |
| DMRG | Renormalización basada en la matriz densidad (del inglés <i>Density Matrix Renormalization Group</i>). |
| DMFT | Teoría de campo medio dinámico (del inglés <i>Dynamical Mean Field Theory</i>). |
| DOS | Densidad de estados (del inglés <i>Density of States</i>). |
| cluster-DMFT | DMFT para un conglomerado de sitios de red. |
| DFT | Teoría del funcional densidad (del inglés <i>Density Functional Theory</i>). |
| LDA | Aproximación de densidad local (del inglés <i>Local Density Approximation</i>). |
| GGA | Aproximación de gradiente generalizado (del inglés <i>Generalized Gradient Approximation</i>). |
| NRG | Grupo de renormalización numérica (del inglés <i>Numerical Renormalization Group</i>). |
| qbit | sistema cuántico de dos estados. |

Índice de contenidos

| | |
|--|-----------|
| Índice de símbolos | i |
| Índice de contenidos | iii |
| Índice de figuras | vii |
| Índice de tablas | xiii |
| Resumen | xv |
| Abstract | xix |
| 1. Materiales correlacionados | 1 |
| 1.1. Introducción general | 1 |
| 1.2. Hamiltonianos modelo | 6 |
| 1.3. Objetivos de la tesis | 9 |
| 2. Diagonalización Exacta y Renormalización con Matriz Densidad | 11 |
| 2.1. Introducción | 11 |
| 2.2. Magnitudes de interés y definiciones | 12 |
| 2.2.1. Sistema bipartito y entrelazamiento | 12 |
| 2.2.2. Respuesta dinámica | 13 |
| 2.2.3. Hibridización y autoenergía | 15 |
| 2.3. Métodos iterativos | 15 |
| 2.3.1. Estado fundamental | 16 |
| 2.3.2. Respuesta dinámica | 17 |
| 2.4. Representaciones y costos | 18 |
| 2.4.1. Uso de memoria | 19 |
| 2.4.2. Costo en tiempo computacional | 20 |
| 2.4.3. Conclusiones sobre los costos | 20 |
| 2.5. Simetrías | 21 |
| 2.5.1. Grupo de simetría | 22 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 2.5.1.1. | Grupo abeliano y cíclico | 23 |
| 2.5.1.2. | Producto directo de grupos | 24 |
| 2.5.1.3. | Respuesta dinámica y grupo | 24 |
| 2.6. | La diagonalización exacta | 25 |
| 2.7. | El DMRG | 27 |
| 2.7.1. | La matriz densidad | 27 |
| 2.7.2. | Algoritmo | 28 |
| 2.7.3. | Operadores complementarios | 30 |
| 2.7.4. | Operador producto de matrices | 31 |
| 2.7.5. | Vector corrección en el DMRG | 33 |
| 2.8. | Códigos implementados en esta tesis | 34 |
| 2.8.1. | Programa de Diagonalización Exacta | 35 |
| 2.8.2. | Programa DMRG | 35 |
| 3. | Teoría de Campo Medio Dinámico | 39 |
| 3.1. | Introducción | 39 |
| 3.2. | Formulación general | 40 |
| 3.2.1. | Periodización para el cluster-DMFT | 43 |
| 3.3. | Impureza efectiva | 44 |
| 3.4. | Ejemplo: modelo de Hubbard en la red de Bethe | 45 |
| 3.5. | Códigos implementados en esta tesis | 46 |
| 4. | Modelos correlacionados de una banda | 47 |
| 4.1. | Introducción | 47 |
| 4.2. | Modelo de Hubbard en la red cuadrada | 47 |
| 4.2.1. | Caso no interactuante | 47 |
| 4.2.2. | Resultados DMFT | 48 |
| 4.3. | Inclusión de correlaciones espaciales | 49 |
| 4.3.1. | Caso no interactuante | 49 |
| 4.3.2. | Resultados | 51 |
| 5. | Modelos correlacionados de dos bandas | 55 |
| 5.1. | Introducción | 55 |
| 5.2. | Modelo de Hubbard hibridizado | 56 |
| 5.2.1. | Simetrías | 56 |
| 5.2.2. | Caso no interactuante | 57 |
| 5.2.3. | Resultados | 58 |
| 5.3. | Modelo de Hubbard-Hund | 61 |
| 5.3.1. | Resultados | 62 |
| 5.4. | Modelo de Kanamori-Hubbard | 62 |

| | |
|---|------------|
| 5.4.1. Límite atómico | 64 |
| 5.4.2. Bandas idénticas | 65 |
| 5.4.3. Bandas diferentes y transición de Mott selectiva | 66 |
| 5.4.3.1. Efectos de la hibridización inter-banda t_{12} | 70 |
| 5.5. Cuasipartículas hueco-doblón interbanda | 71 |
| 5.5.1. Mecanismo | 76 |
| 5.5.2. Relación de dispersión, dopaje e interacción magnética | 79 |
| Conclusiones y perspectivas | 83 |
| Desarrollo de métodos | 83 |
| Física de sistemas correlacionados | 84 |
| Conclusión general | 86 |
| A. Apéndices | 87 |
| A.1. Red de Bethe | 87 |
| A.2. Operadores complementarios usados en la tesis | 87 |
| Bibliografía | 91 |
| Publicaciones asociadas | 101 |
| Agradecimientos | 103 |

Índice de figuras

| | |
|---|----|
| 1.1. Espectro de fotoemisión para varios óxidos de metales de transición. Se muestra (con puntos) la intensidad medida en función de la energía y (en línea continua) el cálculo de la densidad de estados usando teoría de bandas con DFT-LDA. U_{eff} se refiere a la interacción de Coulomb efectiva mientras que W se refiere al ancho de banda. Tomado de [1]. | 4 |
| 2.1. Esquema de las iteraciones DMRG. A la izquierda el crecimiento, a la derecha los barridos. | 29 |
| 3.1. Esquema de la idea original del DMFT. Tomado de [1]. | 40 |
| 3.2. Esquema del problema de impureza para el celular-DMFT de 1, 2 y 4 sitios. Los círculos (cuadrados) representan sitios no-interactuantes (interactuantes), y las líneas corresponden a las hibridizaciones. El grafo se duplica por el grado de libertad de espín. | 42 |
| 3.3. Esquemas de las ocupaciones para la misma impureza, representando el baño en forma de estrella (izquierda) y de cadena (derecha) (tomado de [2]). | 45 |
| 4.1. A la izquierda: sistema semilleno para $U = 1; 2; 3; 4$. A la derecha: $U = 3$ y cambiamos el potencial químico $\mu = 0; -0,5; -1$. En la parte superior se muestra la DOS y en la parte inferior, la parte imaginaria de la autoenergía y el llenado en función de μ , respectivamente. Este último gráfico muestra el carácter metálico. Usamos un baño de 30 sitios y $\eta = 0,12$. La energía de Fermi se ubica en $\omega = 0$ | 49 |
| 4.2. Arriba: DOS para $U = 4$, los mismo parámetros que en Figura 4.1, y varios potenciales químicos. Abajo: llenado vs μ mostrando la transición de metal a aislante. | 50 |
| 4.3. Esquema de la super-red en el espacio directo y recíproco. Aquí L corresponde a nuestro L_x , tomado de [3]. | 50 |

| | |
|--|----|
| 4.4. Comparación de la DOS calculada usando distintos tamaños de cluster para el hamiltoniano de Hubbard en la red cuadrada y dos valores de U . Se muestran los resultados usando dos valores diferentes del ensanchamiento η para enfatizar el gap del régimen aislante. Las curvas están desplazadas por claridad. Usamos hasta 60 sitios para la impureza en el c2-DMFT y 36 para el c4-DMFT. | 52 |
| 4.5. Parte imaginaria (línea continua) y real (línea de puntos) de la función de Green para el modelo de Hubbard dopado ($\mu = -0,3$) en la red cuadrada con $t' = -0,05$ y $U = 2$, calculados usando c4-DMFT. A la derecha: función de Green obtenida después de la periodización (Subsección 3.2.1). La energía de Fermi está en $\omega = 0$ y las líneas horizontales están en 0. . | 53 |
| 4.6. DOS para el sistema dopado ($\mu = -0,6$ y llenado $\langle n \rangle \approx 0,927$) con hopping a segundos vecinos $t_p = -0,05$, $U = 3$. Se observa la formación de gap en $\omega \in [0,5, 1,5]$ e indicios de pseudogap en $\omega = 0$. Este es un modelo mínimo de los materiales superconductores basados en cupratos en estado normal. | 53 |
| 5.1. Funciones de Green no interactuantes $(G_0)_{11}$ (línea continua) y $(G_0)_{22}$ (línea discontinua) para $t = 1$, $t' = 0,6$, $\Delta = 0,5$, $\eta = 0,2$ | 57 |
| 5.2. Transición de Mott para el sistema dopado, $\mu = -0,7$. La transición parece ocurrir simultáneamente en ambos orbitales. Campo cristalino $\Delta = 0,3$, $t' = 0,15$ y $\mu = -0,7$. A la derecha: llenado de orbitales vs U . . | 58 |
| 5.3. Efecto del campo cristalino Δ para el metal dopado $\mu = -0,3$. DOS para $U = 1$, $t' = 0,15$ y $\mu = -0,3$, cambiando Δ se ve una transferencia de carga de la banda 1 a la 2. A la derecha: los llenados correspondientes. . | 59 |
| 5.4. El sistema se dopa sucesivamente pero la ocupación sólo cambia en el orbital 1, mientras el orbital 2 mantiene $n_2 = 1$. Se mantiene el carácter metálico al haber densidad de estados en 1. Igual que en la Figura 5.3 pero para $U = 3$, $\Delta = 1$ | 59 |
| 5.5. A la izquierda y centro: DOS de cada orbital en función de U para $t' = 0,15$ y $t' = 0,3$, respectivamente. A la derecha: el correspondiente peso del pico central en la banda 2 como función de U en escala semi-logarítmica. Fijamos $\Delta = 0,75$, $\mu = -0,75$ | 60 |
| 5.6. Situamos el potencial químico entre las dos bandas de Hubbard para cada orbital, diferenciando sin embargo la posición relativa de estas. La transición de Mott se observa simultáneamente en ambos. No encontramos evidencia de transición selectiva para estos parámetros. | 60 |

| | |
|---|----|
| 5.7. En la parte superior: DOS y parte imaginaria de la autoenergía Σ . Se ve la transición metal-aislante de Mott al aumentar U (izquierda) y de Hund al aumentar J (derecha). Parte inferior: peso de cuasipartícula en función U para varios valores de J/D . Comparación de DMFT+DMRG (gráfico de arriba, $U_c = 3,2$) con bosones esclavos (gráfico de abajo, $U_c = 4,8$, datos de Jorge Facio [4]). Los resultados sugieren una transición de primer orden para $J \neq 0$. En la figura se usó J con signo opuesto. | 63 |
| 5.8. Comparación de la G y Σ como funciones de ω para $U_{12} = 0,2U$ (línea continua) con el caso de una banda (línea discontinua). Observamos un alto grado de coincidencia, mostrando que las dos bandas se comportan como si estuvieran desacopladas. El ensanchamiento lorentziano es $\eta = 0,2$ y a esto se debe que $\text{Im}[\Sigma] _{\omega=0} \neq 0$ | 66 |
| 5.9. Densidad de estados cerca de la transición metal-aislante para $U_{12}/U = \{0,2; 0,8; 0,9; 1\}$. Las dos bandas son idénticas y $J = 0$. Nótese la estructura central tipo 3 picos para $U_{12}/U = 0,8; 0,9$ que hace una diferencia respecto a las otras dos y que guarda relación con las cuasipartículas que estudiamos cuando se consideran dos bandas diferentes. | 67 |
| 5.10. Comparación de la DOS en función de ω para $U_{12}/U = 0,9$ (arriba) y $U_{12}/U = 1$ (abajo). Se observó un especie de salto discontinuo en el pico central al aumentar U para $U_{12}/U = 0,9$, diferente a lo que ocurre en $U_{12}/U = 0,2$ y $U_{12}/U = 1$. En la figura U' se refiere a U_{12} | 68 |
| 5.11. Estudio de la transición metal-aislante. Se observa un salto del peso de cuasipartícula Z para $U_{12}/U = 0,9$, sugiriendo una transición de primer orden; este resultado también es sugerido en un estudio similar usando bosones esclavos y CTQMC [5]. | 68 |
| 5.12. DOS para el modelo de Kanamori-Hubbard semilleno en la red de Bethe, mostrando la transición de Mott selectiva en orbital. Usamos $t_2 = t_1/2$, $J = U/4$, $U_{12} = U - 2J$. El panel superior (inferior) corresponde a la banda 1 (2). A la izquierda: cambiando U para $t_{12} = 0$. A la derecha: cambiando t_{12} para $U = 1,5$. Se muestran dos valores de ensanchamiento lorentziano η para enfatizar la región del gap en la fase aislante. | 69 |
| 5.13. DOS en función de ω para $t_2 = t_1/2$, $U = 1,5$, $t_{12} = 0$ (como en Figura 5.12) pero con $J = 0$, $U_2 = 0,9U$. Se obtiene una combinación metal aislante tipo OSM. Notar la estructura intra-gap que aparece en el orbital aislante. | 70 |
| 5.14. DOS en función de ω para $t_2 = t_1/2$, $t_{12} = 0$, $U = 1,5$, $J = 0$, $U_2 = 0,9U$ (como en Figura 5.13) pero con un pequeño valor $t_{12} = 0,05$. Se pierde la fase OSM. | 71 |

- 5.15. DOS como función de U para $\Delta = U - U_{12} = 0,3$, $t_2 = t_1/2$. (a) completamente metálico (aquí $\Delta = 0,2$ para mejor visualización) donde se muestran ambas QP, (b) Fase orbital selectiva, mantiene sólo QP_W , (c) Estado completamente aislante (notar las diferencias en el eje de energía). En línea continua la banda 1, y en discontinua la banda 2. El esquema muestra los estados relevantes a nivel atómico que participan en cada una de las características principales de la DOS en la fase OSM: el pico central de Kondo, los picos laterales dentro del gap y las bandas de Hubbard. 72
- 5.16. Dependencia de la posición ω_p del pico de la QP_W con Δ en la banda angosta; $U = 3$ y $t_2/t_1 = 0,5$. Para Δ pequeño el sistema es metálico. Recuadro: Dependencia lineal de ω_p vs Δ 73
- 5.17. DOS de un sistema con $L = 8$ sitios (3 sitios de baño por orbital de impureza) calculado usando diagonalización exacta. La línea continua verde (azul) corresponde al espectro de excitación de $G_W^>$ ($G_N^>$, ver texto) representando los pares hueco-doblón entre bandas. Los picos de QP corresponden a estas excitaciones. A la izquierda: $U = 3$, $\Delta = 0,3$ y $t_2 = 0,5t_1$. A la derecha: $U = 3,1$, $\Delta = 0$ y $t_2 = 0,02t_1$. También mostramos la correlación espín-espín $\langle \mathbf{S}_I \cdot \mathbf{s}_{\text{baño}-I} \rangle$ (con $I = 1, 2$) en el fundamental y se ve que el pico central en la banda 1 es tipo Kondo mientras que en la banda 2 no lo es. 74
- 5.18. Pesos de cuasipartícula Z en cada banda (banda 1, línea continua; banda 2, línea punteada) vs U para $\Delta = 0$, $t_2 = 0,02t_1$, $t_2 = 0,1t_1$ y $t_2 = 0,5t_1$ mostrando una transición de metal a aislante simultánea incluso para una relación de anchos de bandas muy pequeña. Recuadro: DOS para $t_2 = 0,02t_1$ mostrando los picos en la energía de Fermi cerca de la transición para $U = 3,3$ (línea continua: banda ancha; línea punteada: banda angosta). 76
- 5.20. Esquema de las configuraciones relevantes de la impureza efectiva $|i_1, i_2\rangle$ (por claridad omitimos los sitios de baño) participantes en cada uno de los rasgos principales de la DOS: el pico central de Kondo, los picos de QP y la banda superior de Hubbard: a) metal, b) OSM (metal en banda 1, aislante en banda 2), c) aislante. Nótese que el operador de creación en la banda 1 (2) se representa con línea continua (discontinua). Los espines \uparrow sueltos también pueden ser \downarrow 78

| | |
|---|----|
| 5.19. DOS para los estados metálico ($t_1 = 0,2, t_2 = 0,1$), OSM ($t_1 = 0,2, t_2 = 0,001$) y aislante ($t_1 = 0,002, t_2 = 0,001$), de arriba hacia abajo. Tomamos $U = 3$. La línea continua (discontinua) corresponde a la “banda” 1 (2). El pico central de Kondo está dividido por la finitud del sistema. Los picos de QP están ubicados a energía $\sim \Delta = 0,3$ y corresponden a pares hueco-doblón enlazados. En el recuadro mostramos un esquema del hamiltoniano de diagonalización exacta para interpretar los resultados DMFT: los cuadrados representan las impurezas y los círculos los sitios de baño. | 79 |
| 5.21. DOS en la banda 1 (izquierda) y 2 (derecha) para $U = 2,8, \Delta = 0,3$ cambiando el potencial químico μ (energías relativas a μ), donde podemos ver que los picos de QP no se afectan. Los llenados correspondientes para la banda metálica son 0.99, 0.98 y 0.89 de arriba hacia abajo. La banda 2 permanece semillena. Es interesante ver cómo los picos de QP, a diferencia de las bandas de Hubbard, permanecen exactamente en la misma energía relativa a la energía de Fermi. | 80 |
| 5.22. Izquierda: DOS con $J = 0, U = 3, U_{12} = 2,7, t_2 = t_1/2$. Derecha: relación de dispersión para esos parámetros. | 81 |
| 5.23. Izquierda: DOS para $U = 2,3, J = 0,02U, U_{12} = U - 2J$. Derecha: relación de dispersión. Las QP son robustas frente a J . Se observa su desdoblamiento. | 82 |

Índice de tablas

| | | |
|------|--|----|
| 2.1. | Costo en memoria de algunos tipos de operadores, sólo el orden de magnitud: para la representación directa $\sim m^4 f$ y para la bipartita $\sim 2Mm^2 f_1$. La columna factor se refiere a la ganancia $m^4 f / (2Mm^2 f_1)$ relativa. Los operadores a, b, c, d son elementales sobre el orbital indicado en su subíndice. La partición en dos del sistema se realiza en $L/2$, excepto cuando se introduce el espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$, que se hace en L , separando los qbits según espín. | 20 |
| 2.2. | Costo en tiempo computacional asociado a algunos tipos de operadores, idem a Tabla 2.1. La columna «directa» es ahora $m^4 f$, la «bipartita», $2Mm^3 f_1$ y «factor», $m f / (2M f_1)$. Si se paraleliza (Ecuación 2.9) podría obtenerse un factor M extra. | 21 |
| 5.1. | Niveles atómicos de (Ecuación 5.9). Los estados representantes se eligen teniendo en cuenta la simetría de inversión de espín, ver Sección 2.5. Se escribe la configuración del orbital 1 seguida de la del orbital 2. Cada orbital puede tener 4 estados $\{0, \uparrow, \downarrow, d\}$ donde $d = \uparrow\downarrow$. Nótese que los estados de 1 y 3 partículas tienen la misma energía, lo mismo con los estados de 0 y 4 partículas debido a la simetría electrón hueco. El mínimo de energía está en semilleno, como era de esperar. La columna “energía relativa” se refiere a la energía de la configuración respecto al estado fundamental. | 65 |

Resumen

Estudiamos varios modelos paradigmáticos de materiales correlacionados usando la teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) bajo un tratamiento unificado. El problema auxiliar de impureza generado en las iteraciones DMFT se resuelve usando Renormalización basada en la Matriz Densidad (DMRG), con vector corrección, de forma que todas las escalas de energía se tratan con igual precisión y la densidad de estados (DOS) se obtiene en el eje real. Calculamos modelos tipo Hubbard, Hubbard-Hund y Kanamori-Hubbard, teniendo en cuenta la interacción de Coulomb intra (inter) orbital U (U_{12}) y el acoplamiento de Hund J , en la red de Bethe y red cuadrada, de una o dos bandas (con o sin hibridización interorbital), sistemas semillenos y dopados. Así logramos caracterizar fenómenos bien conocidos como la transición metal-aislante de Mott a temperatura cero, y otros interesantes como la transición de Hund y la transición selectiva en orbital.

Con la idea de estudiar correlaciones espaciales, para un modelo tipo Hubbard de una banda en la red cuadrada, inspirado en los cupratos, implementamos el cluster-DMFT de 2 y 4 sitios, en su variante celular. Logramos reproducir preliminarmente resultados obtenidos con otras técnicas numéricas, pudiendo obtener la DOS directamente en el eje real con baños hasta 4 veces más grandes que los considerados hasta ahora, con lo cual se reduce el efecto de tamaño finito.

Estudiamos el modelo de Hubbard de dos bandas en la red cuadrada en presencia de hibridización interorbital entre primeros vecinos y desdoblamiento por campo-cristalino. Encontramos que dicha hibridización siempre lleva a una DOS local finita en la energía de Fermi en los dos orbitales cuando al menos una de las bandas es metálica. Cuando los parámetros del modelo son tales que el potencial químico está en la banda de Hubbard del orbital 1 y entre las bandas de Hubbard del orbital 2, en este último aparece un pico de cuasipartícula en el nivel de Fermi cuyo peso decae exponencialmente con la interacción U . El comportamiento es similar a la física de Kondo donde la banda 1 hace el papel de baño no interactuante.

En un modelo de dos bandas tipo Hubbard-Hund invariante rotacional, caracterizamos el espacio de parámetros U, J . Observamos la transición metal-aislante al aumentar U (transición de Mott) y también al aumentar J (transición de Hund). Calculamos el

peso de cuasipartícula y obtuvimos que, para $J \neq 0$, la transición de Mott es de primer orden como función de U y es de segundo orden para $J = 0$. Estos resultados están de acuerdo con el comportamiento obtenido por colaboradores usando bosones esclavos y también Monte Carlo cuántico.

En modelos tipo Hubbard-Kanamori de dos bandas iguales, nuestros resultados sugieren que la transición de Mott es de primer orden cuando $U_{12} \lesssim U$ y es continua cuando $U_{12} = U$ o cuando $U_{12} < U/2$. Para bandas diferentes, obtuvimos la transición de Mott selectiva en orbital. Observamos que ésta es estable frente a la hibridización interorbital (t') si $U_{12} \lesssim U/2$, coincidiendo con otros autores, mientras que desaparece con t' si $U_{12} \lesssim U$. Nuestros resultados poseen la ventaja de mostrar la DOS en el eje real de frecuencias.

Estudiando estos modelos de dos bandas, encontramos unas excitaciones novedosas, que aparecen como picos en la DOS, en energías del orden de $\Delta = U - U_{12}$ para la fase metálica, hasta ahora no reportados en la literatura. Caracterizamos las cuasipartículas asociadas a estas excitaciones, concluyendo que son pares hueco-doblón interorbital. Una DOS finita en la energía de Fermi de una banda está correlacionada con el surgimiento de estados de cuasipartícula bien definidos a energías Δ en la otra banda. Una importante consecuencia de este mecanismo es que en el caso simétrico $U_{12} = U$ el pico de esta cuasipartícula se sitúa en la energía de Fermi, sin importar si una banda es mucho más angosta que la otra. Esto significa que ambas bandas son metálicas mientras una lo sea: no hay transición selectiva. Nuestros cálculos confirman esta predicción y además muestran que, para una relación de $1/50$ de los anchos de banda, el pico en la energía de Fermi en la banda ancha aparece por el mecanismo de Kondo mientras que en la banda angosta aparece debido a las mencionadas cuasipartículas. Este resultado da por terminada una controversia de más de una década entre diferentes autores donde algunos sostenían que podía haber una transición selectiva cuando el cociente de los anchos de banda fuese menor que $1/5$.

Gran parte de esta tesis estuvo abocada al desarrollo de métodos computacionales de avanzada para el cálculo de las propiedades mencionadas arriba. Desarrollamos tres softwares de libre acceso para la diagonalización exacta, el DMRG y el DMFT, respectivamente, con la suficiente eficiencia, generalidad y abstracción para poder tratar todos estos problemas a la vez y que puedan ser extendidos fácilmente a nuevos modelos o parámetros. Un aporte relevante fue la implementación del DMRG para la impureza efectiva que forma parte esencial del DMFT. Para esto, para la impureza efectiva representamos la hibridización en forma de “estrella” (ver [Figura 3.3](#)) -y separada en espín- y no en forma de “cadena” como se hacía tradicionalmente, mejorando considerablemente el costo de los cálculos. El mismo programa DMRG permite hacer cálculos de hamiltonianos generales tipo química cuántica, tanto del estado fundamental como de la respuesta dinámica. La técnica desarrollada en esta tesis es una de las

más adecuadas y confiable para el cálculo de estructura electrónica a temperatura cero de sistemas correlacionados.

Palabras clave: MATERIALES CORRELACIONADOS, MÉTODOS COMPUTACIONALES, PROPIEDADES ELECTRÓNICAS, CAMPO MEDIO DINAMICO

Abstract

We study several paradigmatic models of correlated materials using the Dynamical Mean Field Theory (DMFT) under an unified treatment. The auxiliary impurity-problem generated in the DMFT iterations is solved with the Density Matrix Renormalization Group (DMRG), using the correction vector, so that all energy scales are treated on equal footing and the density of states (DOS) is obtained in the real axis at zero temperature. We calculate Hubbard, Hubbard-Hund and Kanamori-Hubbard type models, taking into account the intra (inter) orbital Coulomb's interaction U (U_{12}) and the Hund exchange coupling J , in the Bethe lattice and in the square lattice. We considered one and two bands with and without interorbital hybridization, and half-filled and doped systems. We characterized well-known phenomena such as the metal-insulator Mott transition, and other interesting physical phenomena such as the Hund transition and the orbital-selective transition.

To study spatial correlations for the one-band Hubbard model in the square lattice, we implemented the cellular-DMFT with 2 and 4 sites. We reproduce previous results obtained with other numerical techniques, being able to obtain the DOS directly on the real axis with baths up to 4 times larger than those considered up to now, which reduces the finite-size effects.

We study the two-band Hubbard model in the square lattice including nearest-neighbors interorbital hybridization and crystal-field splitting. We find that such hybridization always leads to a finite DOS at the Fermi energy for both orbitals when at least one of the bands is metallic. When the parameters of the model are such that the chemical potential is at the lower Hubbard band of the orbital 1 and between the Hubbard bands of the orbital 2, a quasi-particle peak appears for the orbital 2 at the Fermi level, whose weight decays exponentially with the interaction U . This behavior is similar to the Kondo physics where band 1 plays the role of the non-interacting bath.

For a two-band Hubbard-Hund model with rotational-invariant interaction, we characterize the parameter space U , J . We observe the metal-insulator transition when increasing U (Mott transition) and also when increasing J (Hund transition). We calculate the quasiparticle weight and we obtain that, for $J \neq 0$, the Mott transition is first-order as a function of U and it is second-order for $J = 0$. These results are in

agreement with the behavior obtained by collaborators using slave-bosons and Quantum Monte Carlo techniques.

For Hubbard-Kanamori models of two equal bands, our results suggest that the Mott transition is first-order when $U_{12} \lesssim U$ and it is continuous when $U_{12} = U$ or when $U_{12} < U/2$. For different bandwidths, we obtain the orbital-selective Mott transition. We note that it is stable against interorbital hybridization (t') if $J = U/4$, $U_{12} = U/2$, in agreement with other authors, while disappearing with t' if $U_{12} \lesssim U$.

Studying these two-band models, we find novel excitations, which appear as peaks in the DOS, for energies of order $\Delta = U - U_{12}$ for the metallic phase. We characterize the quasiparticles associated with these excitations, concluding that they are interorbital holon-doublon pairs. We find that a finite density of states at the Fermi energy in one band is correlated with the emergence of well defined quasiparticle states at excited energies Δ in the other band. An important consequence of this mechanism is that in the symmetric case $U_{12} = U$ the peak of this quasi-particle lies at the Fermi energy, regardless of whether one band is much narrower than the other. This means that both bands are metallic as long as one is metallic and there is no selective Mott transition. Our calculations show that, even for very small bandwidth ratios, the peak at the Fermi energy in the wide band is formed by the Kondo mechanism while it appears in the narrow band due to the mentioned quasiparticles. This result ends a long-standing controversy between different authors where some argued that there could be a selective transition when the bandwidth ratio was less than 1/5.

Much of this thesis was devoted to the development of advanced computational methods for calculating the above mentioned properties. We develop three open-source softwares for the exact diagonalization, the DMRG and the DMFT, respectively, in an efficient, general and abstract form such that they are able to treat all these problems at the same time and they can easily be extended to new models or parameters. A relevant contribution was the implementation of the DMRG for the effective impurity that forms an essential part of the DMFT. For this, we use the «star-geometry» representation of the hybridization, also separated by spin, instead of the «chain-geometry» representation as was traditionally done, considerably improving the cost of calculations. The same DMRG program allows calculations using a general quantum-chemistry Hamiltonian for both the ground state and the dynamic response. The technique developed in this thesis is one of the most adequate and reliable numerical methods for the calculation of electronic structure of correlated systems at zero temperature.

Keywords: STRONGLY-CORRELATED MATERIALS, COMPUTATIONAL METHODS, ELECTRONIC PROPERTIES, DYNAMICAL MEAN FIELD THEORY

Capítulo 1

Materiales correlacionados

1.1. Introducción general

La física del estado sólido actual es capaz de explicar las propiedades de numerosos materiales como metales simples, semiconductores y aislantes. Este gran éxito está basado en que la correlación entre los electrones en estos materiales es relativamente débil, debido al apantallamiento de la interacción de Coulomb. Como cimiento conceptual se tiene a la teoría de Landau sobre líquidos de Fermi, donde el gas de electrones no interactuantes (en el caso de un cristal, la teoría de bandas) es el marco de referencia y sobre este, adicionando modos colectivos, se construyen cuasipartículas débilmente interactuantes. En la práctica se ha vuelto un estándar realizar teoría de perturbaciones sobre las implementaciones disponibles de la Teoría del Funcional Densidad (DFT) [6], más bien sus versiones aproximadas de densidad local LDA o GGA [7]. Todas estas herramientas fallan al intentar explicar las propiedades de los materiales correlacionados [8].

Se llaman *materiales correlacionados* a aquellos donde los electrones experimentan fuertes interacciones de Coulomb debido al confinamiento espacial en los orbitales atómicos (típicamente en orbitales d ó f abiertos), en comparación con la energía cinética asociada al movimiento en el cristal. Estos electrones no pueden ser descritos como cuasipartículas independientes embebidas en un campo medio creado por los otros electrones, porque la influencia de un electrón sobre otro es demasiado pronunciada cuando ambos coinciden en algún átomo de la red cristalina.

La investigación de materiales con fuertes correlaciones electrónicas ha generado mucho interés en las últimas décadas. Esto se debe a sus propiedades fascinantes como la superconductividad de alta temperatura crítica (en cupratos y ferro-pníctidos), la magnetorresistencia colosal (en manganitas), los grandes cambios en la resistividad durante la transición metal-aislante (en óxidos de vanadio), la compresión brusca del volumen en transiciones de fases (en actínidos y lantánidos, serie f de la tabla periódica).

dica), o el comportamiento de fermiones pesados (Sr_2RuO_4), por sólo citar algunos ejemplos. Adicionalmente, presentan alta sensibilidad a pequeños cambios en su composición química, dopaje, temperatura, presión, campos eléctricos o magnéticos, entre otros, lo cual los hace muy atractivos desde el punto de vista de las aplicaciones. En estos materiales las correlaciones fuertes entre los electrones juegan un papel central y representan el mayor reto para el entendimiento y control de los fenómenos referidos.

Aislantes de Mott y metales correlacionados

En el marco de la teoría de bandas para los materiales con electrones débilmente interactuantes, las bandas se originan esencialmente por la estructura periódica de los átomos en el cristal. Los electrones se comportan como ondas planas extendidas. Con gran éxito se establece la clasificación de aislantes para aquellos materiales que tienen completamente llena la última banda ocupada; y de metales, si ésta está parcialmente vacía. El nivel de Fermi de un aislante se encuentra en una brecha de energía (gap) entre la última banda ocupada y la primera vacía, y el de un metal se encuentra en la última banda ocupada. Los semiconductores son aislantes con un gap pequeño del orden de las excitaciones térmicas.

Las limitaciones de la teoría de bandas se identificaron por primera vez [9] en óxidos de metales de transición con capa d parcialmente llena: concretamente óxido de níquel y óxido de manganeso. Estos materiales son aislantes (o conductores muy pobres) a pesar de tener bandas parcialmente llenas y no presentar orden magnético de largo alcance, en contra de lo que predice la teoría de bandas. Estos son dos ejemplos típicos de *aislantes de Mott* y pertenecen al conjunto de los materiales fuertemente correlacionados.

La explicación simple del carácter aislante en este caso (propuesta por Mott [10]) se basa en retomar el modelo atómico. Pensemos en un orbital y un electrón por sitio. En ausencia de interacción de Coulomb, se forma una banda producto de la superposición de los orbitales en el cristal, en la que caben 2 electrones por sitio. Sin embargo, al considerar una interacción local de Coulomb grande y poner un segundo electrón en el sitio, éste sentiría una fuerte repulsión y pasaría a formar una nueva «banda» de mayor energía. De forma que tenemos dos bandas (conocidas como bandas de Hubbard): una inferior, para los electrones que ocupan un sitio anteriormente vacío, y otra superior, para los electrones que ocupan un sitio ya ocupado por otro electrón. Con esto, bastaría con un electrón por sitio para llenar la banda inferior y de ahí el carácter aislante de estos materiales. Cabe aclarar que en realidad el movimiento de un electrón extra por la banda superior no es coherente como en el caso débilmente interactuante, sino que se realiza rebotando de sitio en sitio incoherentemente [8].

En conclusión, los aislantes de Mott están formados por átomos con orbitales (d ó f) parcialmente llenos. En estos materiales los electrones se encuentran localizados en

los sitios de red debido a la fuerte repulsión de Coulomb.

Hasta aquí presentamos dos cuadros relativamente bien comprendidos de la estructura electrónica: por un lado, tenemos el caso de interacción débil que se puede comprender con la teoría de bandas (electrones itinerantes), y, por otro, tenemos el caso de interacción muy fuerte que se entiende con la idea de aislante de Mott (electrones localizados).

La modelación más compleja tiene lugar para los materiales que no están en ninguno de estos extremos, como es el caso de las fases metálicas cercanas al aislante de Mott (*metales correlacionados*). Los metales correlacionados están compuestos por electrones que no son ni completamente itinerantes, ni localizados, manifestando su carácter dual onda-partícula. Esta competencia entre itinerancia y localización está en la esencia del problema de «muchos cuerpos» para los electrones, su comprensión representa uno de los principales desafíos intelectuales de la física moderna.

Las bandas de Hubbard y la transición de Mott tienen manifestaciones experimentales evidentes, como se muestra en la [Figura 1.1](#). En este estudio, todos los metales de transición tienen un electrón en la capa d . De arriba hacia abajo la correlación aumenta, yendo desde un metal débilmente correlacionado (ReO_3) hasta un aislante de Mott ($LaTiO_3$ y $YTiO_3$). Puede verse la banda inferior de Hubbard centrada en una energía de alrededor de -1.5eV , tanto para los aislantes de Mott como para el metal correlacionado ($SrVO_3$), aspecto no reproducible con cálculos de estructura de banda (DFT-LDA). Nótese que en el $SrVO_3$ se observan simultáneamente la banda de Hubbard y el pico metálico coherente, este último renormalizado (debido a las interacciones) a la mitad de lo que predice la teoría de bandas. Esta estructura de tres picos (sumando la banda superior de Hubbard) es una manifestación directa del carácter metálico correlacionado.

También podemos encontrar metales correlacionados en materiales que no están cerca de la transición de Mott. Tal es el caso de los óxidos de metales de transición como rutenatos y ferro-pnictidos. Estos óxidos se distinguen por ser materiales multibandas, esto es, el nivel de Fermi es atravesado por varias bandas que provienen de orbitales d . En estos casos, el acoplamiento (o intercambio) de Hund¹ juega un papel central en el origen de las correlaciones [11]. Los materiales correlacionados multibandas (por ejemplo, superconductores basados en hierro) presentan características físicas notablemente distintas que los metales (de una banda efectiva) cercanos a la transición de Mott (por ejemplo, los cupratos). La modelización de los primeros representa un desafío mayor al tener que considerar necesariamente efectos de interacción adicionales.

¹Cuando se considera la interacción de Coulomb para más de un orbital en un átomo, aparece el término de intercambio (de Hund) que disminuye la repulsión para dos electrones que ocupan orbitales distintos con espines paralelos comparada con la repulsión directa entre electrones que ocupan el mismo orbital.

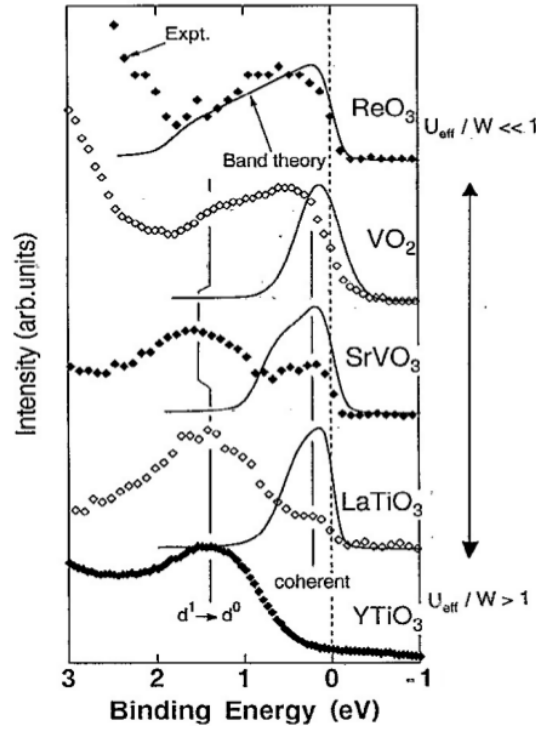


Figura 1.1: Espectro de fotoemisión para varios óxidos de metales de transición. Se muestra (con puntos) la intensidad medida en función de la energía y (en línea continua) el cálculo de la densidad de estados usando teoría de bandas con DFT-LDA. U_{eff} se refiere a la interacción de Coulomb efectiva mientras que W se refiere al ancho de banda. Tomado de [1].

El campo medio dinámico

A pesar del gran éxito de métodos basados en primeros principios, como el mencionado DFT (aproximaciones LDA o GGA), para el cálculo de la estructura electrónica de sistemas débilmente interactuantes, hay problemas fundamentales que aparecen cuando se tienen en cuenta los orbitales más localizados tipo d ó f , para los cuales es importante considerar con más detalle las correlaciones electrónicas. Los métodos basados en DFT+LDA no son capaces de describir apropiadamente las correlaciones fuertes entre electrones.

Para salvar estas dificultades, se desarrolló la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) [8, 12] -y sus variantes de cluster (conglomerado de sitios)-, que permite extender los métodos DFT tratando en forma confiable las correlaciones dinámicas de electrones. El DMFT se ha convertido en uno de los métodos básicos para calcular la estructura electrónica realista de bandas en materiales fuertemente correlacionados [8, 12, 13].

La aproximación DMFT parte del hallazgo de que la teoría de perturbaciones para fermiones interactuantes en la red es mucho más simple cuando la dimensión espacial es muy grande, particularmente, la autoenergía es puramente local al sitio de red. Esto significa que el problema de la red se puede hacer corresponder con el de una impureza efectiva, que consiste en un sitio interactuante y un baño fermiónico no interactuante.

Un punto fundamental en el método es por tanto la solución del problema de esta impureza donde el entorno fermiónico tiene que ser determinado auto-consistentemente hasta lograr la convergencia de la función de Green local al sitio y la consiguiente autoenergía. Esta aproximación es exacta en el límite de dimensiones infinitas, el límite no interactuante y el límite atómico (sitios aislados). Por consiguiente, el éxito del DMFT reside en la capacidad de resolver confiable y precisamente el problema asociado de la impureza cuántica correlacionada.

Durante las primeras fases de implementación de este método, se han propuesto varias formas de resolver la impureza como son la teoría de perturbaciones iterativas [14], diagonalización exacta (ED) [15], Monte Carlo a la Hirsch-Fye (HFQMC) [16], aproximación non-crossing (NCA)[17], y el grupo de renormalización numérico (NRG) [18]. Estos métodos, si bien efectivos para calcular la transición metal-aislante y otras propiedades de baja energía, tenían serias falencias para incorporar más bandas, otro tipo de interacciones (como espín-órbita, electrón-fonón, etc), obtención de estructura en las bandas de mayor energía, o hibridización entre bandas. Entre los inconvenientes podemos mencionar el problema de signo y la dificultad para alcanzar bajas temperaturas en el algoritmo HFQMC [19], la falla del NCA en obtener una solución confiable para el estado metálico, la limitación de pocos sitios de red, lejos del límite termodinámico, para el ED y la resolución limitada del NRG (ver algunas mejoras en [20]).

Más recientemente se desarrollaron otras formas de resolver la impureza que mejoraron estos aspectos (al menos parcialmente), entre las que podemos mencionar la Renormalización basada en la Matriz Densidad (DMRG) [21–25], el Monte Carlo de Tiempo Continuo (CTQMC) [26] y la aproximación de intercambio fluctuante (FLEX) [27]. El CTQMC trabaja a temperaturas menores que el HFQMC, pero en él persiste el problema de signo para ciertos modelos, por ejemplo con hibridización interbanda y, lo más importante, también requiere una continuación analítica de las funciones de Green del eje de frecuencias imaginarias al de frecuencias reales, lo cual lo hace no confiable para ciertas cantidades físicas que involucren las bandas de alta energía. Adicionalmente, FLEX está limitado a cierto rango de interacción. Sobre el DMRG hablaremos más abajo.

El usar el DMRG como simulador de la impureza [4] permite obtener una densidad de estados directamente sobre el eje de energías reales, siendo esto una gran ventaja comparado con métodos basados en Monte Carlo, donde las funciones de Green son calculadas sobre el eje de energías imaginarias para luego ser trasladadas al eje real usando métodos analíticos aproximados como entropía máxima, lo cual reduce la confiabilidad de los resultados.

Por otra parte, con el DMRG no se hacen aproximaciones a priori de forma que el método es igualmente confiable para estudiar fases con o sin gap, y en todas las escalas de energía (mientras que el NRG tiene su máxima precisión en la energía de

Fermi). Además permite obtener de forma precisa las densidades espectrales de alta frecuencia, lo cual puede ser relevante para la convergencia del DMFT, y para comparar con experimentos de rayos X y conductividad óptica.

En los trabajos recientes [28–30] se muestran evidencias numéricas de que el DMRG funciona mejor cuando el baño no interactuante se representa en forma de estrella (ver Figura 3.3), en lugar de la forma tradicional de cadena. Para realizar los cálculos de esta tesis hemos adoptado esta mejora (discutimos su fundamentación en la Sección 3.3), lo cual nos permitió resolver impurezas complejas (como las del cluster DMFT de 4 sitios), usando un número razonable de sitios del baño.

1.2. Hamiltonianos modelo

Tradicionalmente, la física de los materiales correlacionados se ha ido aprendiendo a través de hamiltonianos modelo. Estos son hamiltonianos simplificados que describen un conjunto reducido de grados de libertad, y que sin embargo conservan los ingredientes esenciales del fenómeno a comprender. En teoría, podemos obtener un modelo a partir de un problema realista, seleccionando los grados de libertad de baja energía: unas pocas bandas y las interacciones a corto alcance que son las más importantes, dado el mecanismo de apantallamiento en los metales.

Para simplificar la notación, utilizaremos la definición de los operadores en segunda cuantización: c_i^\dagger crea una partícula en el orbital i y c_i la destruye (el símbolo † refiere a traspuesto conjugado). La naturaleza fermiónica de los electrones se refleja en las relaciones de anticonmutación:

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger]_+ = [c_i, c_j]_+ = 0, [c_i^\dagger, c_j]_+ = \delta_{ij} \text{ donde } [A, B]_+ = AB + BA.$$

Además se introduce el concepto de estado vacío $|\emptyset\rangle$ como aquel que no tiene ninguna partícula, esto es, $c_i|\emptyset\rangle = 0 \forall i$. La anti-simetría de los fermiones sale automáticamente: dado $|\psi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |\emptyset\rangle$, intercambiamos los orbitales 1 y 2 y se obtiene $P_{12}|\psi\rangle = P_{12}c_1^\dagger c_2^\dagger |\emptyset\rangle = c_2^\dagger c_1^\dagger |\emptyset\rangle = -c_1^\dagger c_2^\dagger |\emptyset\rangle = -|\psi\rangle$. El operador número de partículas en el orbital i se escribe $n_i = c_i^\dagger c_i$.

Los operadores correspondientes a magnitudes físicas se pueden escribir en términos de los c_i . Un operador que afecte sólo a una partícula, o combinaciones lineales de estos, se expresa como

$$\hat{K} = \sum_{ij} K_{ij} c_i^\dagger c_j, \text{ con } K_{ij} = \langle \phi_i^*(1) \hat{K}(1) \phi_j(1) \rangle$$

donde ϕ_i es el orbital i y $\hat{K}(1)$ es el operador en primera cuantización. Como ejemplo de $\hat{K}(1)$, tenemos la energía cinética $\hat{K}(1) \sim -\nabla_{\vec{r}_1}^2$ con \vec{r}_1 la posición de la partícula. De igual forma, las interacciones de dos partículas, y sus combinaciones lineales, se

escriben

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l, \text{ con } V_{ijkl} = \left\langle \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) \hat{V}(1,2) \phi_k(2) \phi_l(1) \right\rangle. \quad (1.1)$$

Como ejemplo de \hat{V} , podemos mencionar la interacción de Coulomb. En este caso, $\hat{V}(1,2) \sim 1/r_{12}$ es el potencial electrostático, siendo r_{12} la distancia entre las partículas.

En general, los hamiltonianos de interés tienen la forma:

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l. \quad (1.2)$$

Este H también describe las moléculas en química cuántica [31].

Modelo de Hubbard Uno de los modelos paradigmáticos de la materia condensada es el modelo de Hubbard [32]. La interacción de Coulomb se considera completamente local al sitio de red y entre electrones en el mismo orbital con espín contrario. Concretamente:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i,$$

donde $c_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger \right)$ destruye (crea) un electrón con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$ en el sitio i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ es el operador densidad, $n_i = n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}$, t es la integral de energía cinética (*hopping*), U es la repulsión de Coulomb:

$$U \sim \left\langle \phi_i^*(1) \phi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(2) \phi_i(1) \right\rangle,$$

μ el potencial químico, e $\langle ij \rangle$ representa a los primeros vecinos.

El término de energía cinética tiende a favorecer el movimiento itinerante de los electrones. La repulsión de Coulomb favorece que los electrones no «salten» porque pagan energía U al coincidir en un orbital, por tanto tiende a generar electrones localizados. Esta competencia entre itinerancia y localización es la base de la fuerte correlación de electrones en los materiales. Por tanto, el modelo reproduce mucha de la física de los materiales correlacionados como la transición metal-aislante de Mott e incluso se ha usado en la modelación de materiales de interés, como los superconductores de alta temperatura crítica basados en cupratos [33–35].

Se conoce la solución exacta del modelo de Hubbard en una dimensión usando el Bethe Ansatz [36]. También se tiene que en dimensión infinita se puede mapear al modelo de Anderson, ver Sección 3.1. Sin embargo, para el caso general es necesario recurrir al cálculo numérico.

Modelo de Hubbard-Hund Consideremos la interacción de Coulomb local en sistemas de dos orbitales. La integral (Ecuación 1.1) genera el término:

$$U_{I,I'} = \left\langle \phi_I^*(1)\phi_{I'}^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_{I'}(2)\phi_I(1) \right\rangle,$$

que corresponde a la integral directa de Coulomb, y también genera, entre otros, el término:

$$X_{I,I'} = \left\langle \phi_I^*(1)\phi_{I'}^*(2)\frac{1}{r_{12}}\phi_I(2)\phi_{I'}(1) \right\rangle,$$

que representa el intercambio, donde $I, I' = 1, 2$ son índices de orbital. Si consideramos la forma invariante rotacional más simple tenemos [1]:

$$\hat{V}_i = \frac{U}{2}n_i^2 - \frac{J}{2}s_i^2,$$

donde n_i y s_i son los operadores de carga y espín total en el sitio, $n_i = \sum_{\sigma, I=1,2} n_{iI\sigma}$, $\vec{s}_i = \sum_{I\sigma\sigma'} c_{iI\sigma}^\dagger \vec{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{iI\sigma'}$, $\vec{\tau}$ son las matrices Pauli, $c_{iI\sigma}^\dagger$ crea un electrón en el sitio i , orbital I con espín σ , U es el promedio de los U_{IJ} y J es el promedio de los X_{IJ} . Esta fórmula genera automáticamente la primera regla de Hund en el átomo: como $J > 0$ para minimizar la energía hay que maximizar el espín total s_i .

Este modelo de interacción local extendido a la red lo llamamos modelo de Hubbard-Hund:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle I \sigma} c_{iI\sigma}^\dagger c_{jI\sigma} + \sum_i \hat{V}_i - \mu \sum_i n_i.$$

Modelo de Kanamori-Hubbard Al considerar los iones de metales de transición en un campo cristalino cúbico aparecen tripletes de orbitales t_{2g} y también dobletes de orbitales e_g [37]. Luego de escoger una base apropiada, hay sólo 3 integrales de Coulomb independientes (tanto en el t_{2g} como en el e_g): U (U_{12}) para la interacción intra (inter) orbital y J para el intercambio de Hund. En este contexto, la interacción de Coulomb se expresa mediante el hamiltoniano de Kanamori-Hubbard [11]. En esta tesis consideramos el modelo de Kanamori-Hubbard de dos bandas:

$$\begin{aligned} \hat{V}_i = & U \sum_I n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow} + \sum_{\sigma\sigma'} (U_{12} - J\delta_{\sigma\sigma'}) n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} - \\ & - J \left(c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\downarrow}^\dagger c_{i2\uparrow} + c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i1\uparrow} c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow} \right) \\ & - J \left(c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\uparrow} c_{i2\downarrow} + c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow} c_{i1\uparrow} c_{i1\downarrow} \right), \end{aligned}$$

donde $I = 1, 2$ es el índice de orbital, $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ son índices de espín, $J \geq 0$ es el intercambio de Hund, U (U_{12}) es la repulsión de Coulomb intra (inter)-orbital, con $U_{12} \leq U$. Si se quiere invariancia rotacional entonces $U_{12} = U - 2J$.

1.3. Objetivos de la tesis

Como explicamos, es un gran desafío entender la física novedosa presente en los materiales correlacionados. La citada competencia entre el carácter itinerante y localizado de los electrones está en la base del problema, y su estudio y caracterización depende de encontrar técnicas que logren captar las partes relevantes del proceso. Como es ya tradicional en la física, la esencia de los fenómenos se entiende usando modelos simplificados de la realidad que contengan los mínimos ingredientes necesarios, para después incluir los detalles específicos. Nos planteamos como objetivos:

1. Estudiar bajo un marco común los siguientes modelos interactuantes en la red cuadrada y en la red de Bethe, a temperatura cero:
 - a) modelo de Hubbard de una banda,
 - b) modelo de Hubbard de dos bandas hibridizadas y con campo cristalino,
 - c) modelo de Hubbard-Hund de dos bandas,
 - d) modelo de Kanamori-Hubbard de dos bandas.

Emplearemos la técnica de DMFT usando el DMRG como simulador de impureza, y verificando los resultados con diagonalización exacta en sistemas pequeños. Como magnitud reveladora de información nos centramos en obtener la densidad de estados en frecuencias reales. Particularmente en el modelo a) proponemos incluir correlación espacial usando también el cluster-DMFT de 2 y 4 sitios.

2. Caracterizar la influencia de los distintos parámetros en las fases metálica y aislante, sistemas dopados, transiciones de fase y aparición de cuasipartículas ligadas a excitaciones locales.
3. Desarrollar y mejorar las técnicas DMFT y DMRG de manera que podamos extenderlas para resolver los modelos de interés en esta tesis y a la vez sentar las bases para su aplicación a modelos realistas similares que contengan los detalles de materiales concretos.

Como es ya sabido, las dificultades que aparecen en la simulación y diseño de materiales correlacionados concretos están dadas justamente por la existencia de efectos de interacción fuerte y no por los detalles específicos de la red o la forma de los orbitales. En pocas palabras, si una técnica es capaz de tratar correctamente un modelo de Hubbard, después puede aplicarse sin mayor dificultad a un material cuya interacción relevante sea tipo Hubbard. Por eso son de trascendencia práctica los objetivos propuestos para esta tesis.

Capítulo 2

Diagonalización Exacta y Renormalización con Matriz Densidad

2.1. Introducción

En este capítulo describimos dos de los métodos numéricos más usados para estudiar los sistemas cuánticos de muchos electrones (correlacionados): la Diagonalización Exacta (ED) y la Renormalización con la Matriz Densidad (DMRG).

La Diagonalización Exacta se basa en usar el espacio de Hilbert completo, pudiendo lidiar con no mucho más que $L = 30$ orbitales sin espín (ó $L = 15$ orbitales con espín $1/2$), debido al conocido crecimiento exponencial del espacio de Hilbert [38, 39]. No obstante, la ED provee información importante sobre las correlaciones al dar la solución completa y exacta, aunque sea en sistemas de pocos sitios. Otra gran virtud es la variedad de modelos y parámetros que puede tratar sin mayor complicación adicional. Proporciona información sobre la dinámica en frecuencia real, y sirve de chequeo a métodos aproximados.

El DMRG es uno de los métodos más poderosos para obtener una buena aproximación del efecto de muchos cuerpos -y fuertes correlaciones- presentes en nuestras modelaciones. Es un método variacional no perturbativo. Su éxito en sistemas de baja dimensionalidad se extiende a cálculos muy precisos de propiedades estáticas, dinámicas y hasta termodinámicas [40]. Es el método líder en los sistemas correlacionados unidimensionales [25], logrando alta precisión en sistemas sorprendentemente grandes y a temperatura muy baja o cero.

Todo este éxito se basa, por supuesto, en poder (y saber) seleccionar la información relevante, dentro del espacio de Hilbert exponencialmente grande. La idea del DMRG es como sigue. Después de ordenar convenientemente los sitios (orbitales) que definen el problema, y realizando una bipartición del mismo, la renormalización del espacio ocurre en este caso usando la matriz densidad reducida de cada una de las partes,

tomando los estados de mayor peso estadístico cuántico. Esta matriz densidad queda definida a partir de la aproximación del estado fundamental disponible. Para calcular la dinámica, se incluyen además los estados excitados y el llamado vector corrección correspondiente al intervalo de frecuencias a estudiar.

En general, se deben usar las simetrías del problema para mejorar el rendimiento y la estabilidad. En este capítulo también describiremos la implementación de algunas simetrías de importancia en la tesis.

2.2. Magnitudes de interés y definiciones

Dado el hamiltoniano que caracteriza nuestro sistema físico o modelo, primeramente nos interesa encontrar el autoestado de menor energía o estado fundamental. Luego queremos «medir» ciertas magnitudes en este estado, caracterizando así las propiedades estáticas a temperatura cero.

También resulta de interés encontrar la respuesta dinámica (en tiempo o frecuencia) del sistema ante una excitación dada. Vista en frecuencia, esta caracterización nos mostraría el espectro energético de los estados participantes en el proceso en cuestión. De particular interés resulta la densidad de estados (DOS) asociada al proceso de crear una partícula, esperar un tiempo t , y luego destruirla. Esta DOS determina el carácter metálico o aislante de un material. El carácter metálico se manifiesta en una $DOS > 0$ en el nivel de Fermi, mientras que el carácter aislante se caracteriza por un gap (brecha, $DOS=0$) en la vecindad del nivel de Fermi.

En esta sección definimos y describimos las magnitudes más relevantes relacionadas con esta tesis.

2.2.1. Sistema bipartito y entrelazamiento

Un sistema siempre puede interpretarse como la unión de dos partes disjuntas, a lo cual llamamos sistema bipartito. Sean S y E las dos partes, cuyos estados de la base etiquetamos $|i\rangle$ y $|j\rangle$, respectivamente. Un estado normalizado cualquiera $|\psi\rangle$ lo podemos escribir como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle.$$

Para ir presentando el concepto de entrelazamiento, digamos que el índice i toma valores $i = 1, 2$; mientras que el $j = 1, 2, \dots, m$. Tenemos entonces:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 |i\rangle \underbrace{\sum_{j=1}^m \psi_{ij} |j\rangle}_{|\varphi_i\rangle} = \sum_{i=1}^2 |i\rangle |\varphi_i\rangle. \quad (2.1)$$

Esta simple transformación muestra que de los m estados en E , sólo se usan dos ($|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$) para representar $|\psi\rangle$. Incluso, podría pasar que sólo con un estado en cada parte alcance: $|\psi\rangle = |l_1\rangle |r_1\rangle$. Se dice entonces que $|\psi\rangle$ es un estado producto (o separable), y las partes S y E se comportan como independientes ante una medición. Por ejemplo, si O es un operador separable $O = O_S \times O_E$, su valor esperado es:

$$\langle\psi| O_S \times O_E |\psi\rangle = \langle l_1 | \langle r_1 | O_S \times O_E | l_1 \rangle | r_1 \rangle = \langle l_1 | O_S | l_1 \rangle \langle r_1 | O_E | r_1 \rangle ,$$

$$\langle\psi| O_S \times O_E |\psi\rangle = \langle\psi| O_S |\psi\rangle \langle\psi| O_E |\psi\rangle ,$$

equivalentemente decimos que no hay *entrelazamiento* entre S y E . Por el contrario, si $|\psi\rangle$ no se puede reducir a un estado producto y se tiene $|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle |\varphi_i\rangle$, el valor esperado:

$$\langle\psi| O_S \times O_E |\psi\rangle = \sum_i \langle i | O_S | i \rangle \langle \varphi_i | O_E | \varphi_i \rangle ,$$

no se puede escribir como el producto de los valores esperados en cada parte:

$$\langle\psi| O_S |\psi\rangle = \sum_i \langle i | O_S | i \rangle \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle ,$$

$$\langle\psi| O_E |\psi\rangle = \sum_i \langle \varphi_i | O_E | \varphi_i \rangle .$$

Se dice que en el estado $|\psi\rangle$, las partes S y E están entrelazadas y hay que considerarlas como un todo. Notamos aquí una diferencia sustancial entre un sistema cuántico y clásico, dado que el valor esperado en un estado clásico (un punto en el espacio de fases) siempre es el producto de los valores esperados en cada parte.

Volviendo a (Ecuación 2.1), el hecho de que sólo se necesiten dos estados (de los m posibles) en la parte E podría ser de utilidad para comprimir la base y por tanto el tamaño efectivo del espacio de trabajo. Esta idea es explotada en extremo por el método DMRG. En la Sección 2.7 presentamos un análisis más cuantitativo del entrelazamiento, y de otros conceptos de importancia usados por este método.

2.2.2. Respuesta dinámica

La correlación temporal entre dos operadores \hat{a}^\dagger y \hat{b} respecto al fundamental $|0\rangle$ viene dada por

$$\tilde{G}_{ba}^>(t) = \langle 0 | b(t) a^\dagger | 0 \rangle = \underbrace{\langle 0 | e^{iHt} b e^{-iHt} a^\dagger | 0 \rangle}_{\langle 0 | e^{i\epsilon_0 t} | 0 \rangle} = \langle 0 | b e^{-i(H-\epsilon_0)t} a^\dagger | 0 \rangle ,$$

donde $b(t)$ es el operador en el tiempo t y a^\dagger es el operador en el instante $t = 0$. Usando la representación diagonal del hamiltoniano $H = \sum \epsilon_n |n\rangle \langle n|$, ver (Ecuación 2.6),

$$\tilde{G}_{ba}^>(t) = \sum_n \langle 0| b |n\rangle \langle n| a^\dagger |0\rangle e^{-i(\epsilon_n - \epsilon_0)t}.$$

Si transformamos Fourier, obtenemos la respuesta espectral:

$$A_{ba}^>(\omega) = \sum_n \langle 0| b |n\rangle \langle n| a^\dagger |0\rangle \delta(\omega - \epsilon_n + \epsilon_0),$$

que es conocida como fórmula de Lehmann. Formalmente:

$$A_{ba}^>(\omega) = \langle 0| b \delta(\omega - H + \epsilon_0) a^\dagger |0\rangle. \quad (2.2)$$

Si $a = b = c_i$, o sea, que creamos y luego destruimos un fermión en el orbital i , entonces la respuesta espectral se llama densidad de estados (de una partícula). Nótese que, como $\epsilon_n \geq \epsilon_0$, $A_{ba}^>(\omega) = 0$ para $\omega < 0$, sólo hay densidad espectral $A^>(\omega)$ para frecuencias positivas. Por otra parte, la función de Green retardada se define como

$$\tilde{G}_{ba}(t) = -i\theta(t) \langle 0| [b(t), a^\dagger]_+ |0\rangle,$$

con a, b operadores fermiónicos. Si introducimos

$$A_{ab}^<(\omega) = \langle 0| a^\dagger \delta(\omega - H + \epsilon_0) b |0\rangle, \quad (2.3)$$

(densidad de estados de hueco) entonces para $G(t)$ tenemos la densidad de estados:

$$A_{ba}(\omega) = A_{ba}^>(\omega) + A_{ab}^<(-\omega).$$

Básicamente, $A_{ba}^<$ es la parte a frecuencias negativas del espectro, mientras que $A_{ab}^>$ la parte positiva, y sólo se superponen en $\omega = 0$. En la práctica se usa la representación lorentziana de la delta de Dirac: $\delta(x) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \left[\frac{1}{x + i\eta} \right]$ y se trabaja con $\eta > 0$ pequeño. Las funciones de Green en frecuencia son:

$$G_{ba}^>(\omega) = \langle 0| b \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} a^\dagger |0\rangle, \quad (2.4)$$

$$G_{ab}^<(\omega) = \langle 0| a^\dagger \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} b |0\rangle,$$

$$G_{ba}^{\Re, \Im}(\omega) = G_{ba}^>(\omega) \mp G_{ab}^<(-\omega),$$

$$A_{ba}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im [G_{ba}(\omega)],$$

donde \Re y \Im son las partes real e imaginaria, respectivamente.

2.2.3. Hibridización y autoenergía

Consideremos las excitaciones de una partícula. Para un sistema no interactuante podemos considerar como base los estados de 1 partícula. En este caso, la matriz del hamiltoniano para un sistema bipartito se puede escribir como:

$$H^0 = \begin{pmatrix} H_{11}^0 & H_{12}^0 \\ H_{21}^0 & H_{22}^0 \end{pmatrix},$$

donde 1 y 2 son los espacios de Hilbert de cada parte. En relación con la función de Green, introduzcamos la matriz $G^0 = (\omega - H^0)^{-1}$, de forma que su componente en 1 es (ver inversión por bloque en [41]):

$$G_{11}^0 = \left[\omega - H_{11}^0 - \underbrace{H_{12}^0(\omega - H_{22}^0)^{-1}H_{21}^0}_{\Gamma} \right]^{-1}. \quad (2.5)$$

Esto significa que si las partes están desacopladas ($H_{12}^0 = 0$) entonces la matriz de Green local en 1 es $\bar{G}_{11} = (\omega - H_{11}^0)^{-1}$. Cuando los sistemas están acoplados entonces

$$G_{11}^0 = \left[(\bar{G}_{11})^{-1} - \Gamma \right]^{-1}.$$

Esta es la ecuación de Dyson para el sistema no interactuante. La cantidad Γ se conoce como función de hibridización y resume todo el efecto de la parte 2 sobre la función de Green en la parte 1.

Para el sistema interactuante, el análisis es mucho más complejo, ver por ejemplo [42], pero siempre podemos escribir:

$$G_{11} = [\omega - H_{11}^0 - \Gamma - \Sigma]^{-1} = \left[(G_{11}^0)^{-1} - \Sigma \right]^{-1},$$

donde $\Sigma(\omega)$ es la matriz de corrección añadida debido a los efectos de interacción. Al estar sumada con H_{11}^0 , a Σ se le denomina autoenergía. Esta es la cantidad a calcular al hacer teoría de perturbaciones respecto al parámetro de interacción y que da lugar a las reglas conocidas como diagramas de Feynman [42].

2.3. Métodos iterativos

A continuación exponemos algunos métodos de cálculo de las magnitudes de interés citadas en la Sección 2.2, enfatizando en que dichos métodos se basan solamente en

saber calcular el producto $H|\psi\rangle$, o sea, el efecto del hamiltoniano sobre un estado. Como referencia puede consultarse el manual [38].

2.3.1. Estado fundamental

Los autoestados $|n\rangle$ de H cumplen

$$H|n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$$

donde ϵ_n es la energía. La diagonalización completa de H nos llevaría a escribir

$$H = \sum \epsilon_n |n\rangle \langle n|, \quad (2.6)$$

que, en general, es una representación muy conveniente, pero impracticable, salvo excepciones como los sistemas no interactuantes o de muy pocos orbitales. Para tener una idea concreta, las computadoras actuales pueden diagonalizar completamente un espacio de Hilbert de dimensiones $\sim 10^4 \sim 2^{14}$, mientras que el estado fundamental se puede hallar para dimensiones de hasta $\sim 10^9 \sim 2^{30}$. La gran ventaja aparece cuando, en lugar de hacer un costoso algoritmo para diagonalizar la matriz de H , lo que se hace es un proceso iterativo de rápida convergencia hacia el estado de mínima energía, y sólo se necesita calcular $H|\psi\rangle$ en cada paso. El producto $H|\psi\rangle$ explota al máximo las forma generalmente rala de H y ni siquiera necesita la matriz explícita correspondiente a H .

Método de las potencias: Partiendo de (Ecuación 2.6) y teniendo en cuenta que los autoestados forman un conjunto completo, al aplicar K veces H sobre un $|\psi\rangle$ (aleatorio) se tiene

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle, \\ H^K |\psi\rangle &= \sum_n (\epsilon_n)^K \langle n|\psi\rangle |n\rangle, \end{aligned}$$

si suponemos que todos los autovalores son negativos y llamamos ϵ_0 al menor de ellos (no degenerado), entonces

$$H^K |\psi\rangle = \epsilon_0^K \sum_n \left(\frac{\epsilon_n}{\epsilon_0} \right)^K \langle n|\psi\rangle |n\rangle,$$

y como $\left(\frac{\epsilon_n}{\epsilon_0} \right)^K \rightarrow \delta_{n,0}$ cuando $K \rightarrow \infty$, ya que $\frac{\epsilon_n}{\epsilon_0} < 1$,

$$H^K |\psi\rangle \longrightarrow \epsilon_0^K \langle 0|\psi\rangle |0\rangle,$$

lo cual nos indica que el proceso iterativo converge hacia el estado fundamental. Para convertir esta idea en el método de las potencias, sólo nos falta normalizar $|\psi\rangle$ en cada paso antes de volver a aplicar H .

Método de Lanczos Dado $|\psi\rangle$, el espacio vectorial generado por $\{|\psi\rangle, H|\psi\rangle, \dots, H^K|\psi\rangle\}$ se conoce como espacio de Krylov. El método de Lanczos [39] es una mejora al método de las potencias, donde en cada paso se aplica la ortogonalización de Gram-Schmidt, y además se usa el hecho de que H es hermítico. El algoritmo es:

$$\begin{aligned} |\phi'\rangle &= H|\phi_n\rangle - \beta_n|\phi_{n-1}\rangle, \\ \alpha_n &= \langle n|\psi\rangle \langle \phi_n|\phi'\rangle, \\ |\phi''\rangle &= |\phi'\rangle - \alpha_n|\phi_n\rangle, \\ \beta_n &= \sqrt{\langle \phi''|\phi''\rangle}, \\ |\phi_{n+1}\rangle &= |\phi''\rangle / \beta_n, \end{aligned}$$

donde $|\phi_{-1}\rangle = 0$ y $|\phi_0\rangle = |\psi\rangle$ es el estado inicial (aleatorio) normalizado. Se genera así una representación matricial aproximada de H que es tridiagonal, de dimensión K :

$$M^H = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & & \\ & & \dots & & \\ & & & \beta_{i-1} & \alpha_{i-2} & \beta_{i-1} \\ & & & & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} \end{pmatrix}.$$

El menor autovalor de M^H converge rápidamente hacia el de H . Típicamente con unas 100 iteraciones de Lanczos se logra una precisión de 10^{-14} en la energía del estado fundamental.

2.3.2. Respuesta dinámica

Como vimos anteriormente, la correlación dinámica entre dos operadores \hat{a}^\dagger y \hat{b} respecto al fundamental $|0\rangle$ viene dada por

$$A_{ba}^>(\omega) = \langle 0|b\delta(\omega - H + \epsilon_0)a^\dagger|0\rangle.$$

Esta fórmula tiene el inconveniente de que se necesita el espectro completo de H . En este sentido, cabe citar algunas alternativas iterativas: dinámica a la Lanczos [43], vector corrección [44], y kernel polynomial [45].

Vector corrección Nos centramos en calcular (Ecuación 2.4). Para esto se calcula el vector corrección $|V\rangle = \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} |a^\dagger 0\rangle$ que satisface:

$$(\omega + i\eta - H + \epsilon_0) |V\rangle = a^\dagger |0\rangle; \quad (2.7)$$

y luego $G_{ba}^>(\omega) = \langle 0|b|V\rangle$. El sistema (Ecuación 2.7) se resuelve con un método iterativo, que esté basado en calcular el producto $(\omega + i\eta - H) |\psi\rangle$ en cada paso. En particular nosotros usamos la técnica de mínimo residuo, conocida de los textos de álgebra lineal [46].

Para trabajar con números reales descomponemos en partes real e imaginaria $|V\rangle = |X\rangle + i|Y\rangle$ [47], se resuelve:

$$[(\omega - H + \epsilon_0)^2 + \eta^2] |Y\rangle = -\eta a^\dagger |0\rangle,$$

y finalmente,

$$|X\rangle = -\frac{1}{\eta} (\omega - H + \epsilon_0) |Y\rangle.$$

2.4. Representaciones y costos

En general usamos dos representaciones para el sistema cuántico:

■ Representación directa:

- la base viene dada por estados normalizados $|I\rangle$ en el sistema completo,
- un estado $|\psi\rangle$ corresponde a un vector en la base $|I\rangle$, esto es, $\Psi_I = \langle I|\psi\rangle$,
- un operador O corresponde a una matriz: $O_{II'} = \langle I|O|I'\rangle$.
- aplicar O al estado $|\psi\rangle$ equivale a calcular el vector:

$$\sum_{I'} O_{II'} \Psi_{I'} \quad (2.8)$$

■ Representación bipartita (ver Subsección 2.2.1):

- se preservan las dos bases separadas $|i\rangle$ y $|j\rangle$,
- un estado $|\psi\rangle$ corresponde a una matriz: $\Psi_{ij} = \langle ij|\psi\rangle$,
- un operador $O = \sum_{\alpha=1}^M A^\alpha \otimes B^\alpha$ corresponde a dos listas de matrices: $A_{ii'}^\alpha = \langle i|A^\alpha|i'\rangle$, $B_{jj'}^\alpha = \langle j|B^\alpha|j'\rangle$.
- aplicar O al estado $|\psi\rangle$ equivale a calcular la matriz:

$$\sum_{\alpha} \sum_{i'j'} A_{ii'}^\alpha \Psi_{i'j'} B_{jj'}^\alpha = \sum_{\alpha} A^\alpha \cdot \Psi \cdot (B^\alpha)^t \quad (2.9)$$

Un *qbit* es un sistema cuántico de dos estados, por ejemplo $|0\rangle$ y $|1\rangle$ o también $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$. En general se necesitan dos números complejos para representar un qbit dado que se puede tener cualquier combinación $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ como estado cuántico debido al principio de superposición. Si un sistema tiene L estados de una partícula, y se consideran todas las posibilidades de que cada estado esté ocupado o no, entonces el sistema se corresponde con L qbits, y se necesitan 2^L números para representar un estado. Por ejemplo, el modelo de Hubbard con L' sitios lo podemos representar como 2 cadenas de L' qbits cada una, esto es, $L = 2L'$. En este caso, en cada sitio se tienen 4 posibles estados $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$, que pueden verse como el producto directo de dos bases $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle\} \times \{|0\rangle, |\downarrow\rangle\}$ y por eso $L = 2L'$. En esta tesis preferimos separar las dos cadenas según espín, esto es, la primera cadena de L' qbits está asociada a la ocupación o no de los estados \uparrow en los L' sitios, análogamente, la segunda cadena de L' qbits es para los estados \downarrow . Esta separación en espín resulta ventajosa para reducir el entrelazamiento en el DMRG como veremos más adelante.

A continuación hacemos el análisis de los costos computacionales. Por simplicidad suponemos un sistema con m^2 estados en la base, que se biparticiona a la mitad en dos partes de m estados cada una.

2.4.1. Uso de memoria

El espacio de Hilbert tiene dimensión m^2 , y éste también será el costo en memoria de representar un estado (se necesitan m^2 coeficientes complejos).

El uso de memoria de la representación directa de un operador va como $m^2 \times m^2 f$, donde f es el *llenado* de la matriz (la fracción de valores no nulos). En la representación bipartita la memoria del mismo operador va como $Mm^2(f_1 + f_2)$, donde M es la cantidad de términos en $O = \sum_{\alpha=1}^M A^\alpha \otimes B^\alpha$, y $f_{1,2}$ los llenados de cada parte. Si estuviéramos trabajando con matrices densas (por ejemplo en el DMRG) todas estas fracciones valen 1, y la representación bipartita es menos costosa por un factor $m^2/2M$. El mismo resultado se obtiene si las tres fracciones son similares.

Por otra parte, si se usa la base completa del espacio de Hilbert, la $f \sim T_e/m^2$ donde T_e es la cantidad de términos elementales (términos que aplicados sobre un estado de la base dan como resultado sólo un estado de la base). Nótese que un operador con interacción de dos partículas no puede tener más que L^4 operadores elementales, mientras que la cantidad de estados es exponencial con L , $m^2 \sim 2^L$, de forma que $f \sim L^4/2^L$ es típicamente muy baja, con lo cual se impone el uso de matrices ralas. En la [Tabla 2.1](#) se muestra el costo en memoria de varios tipos de operadores; la columna factor resume la ganancia en el uso de la representación bipartita. Otro aspecto interesante es que, dado que la memoria requerida para representar el estado es $m^2 \sim 2^L$, la memoria usada por el operador genérico O no va a ser la que limite el L a

calcular.

Podemos concluir que desde el punto de vista de la memoria, siempre conviene particionar el sistema en dos. Además, para estos sistemas raros, usando la bipartición, el mayor consumo de memoria se tiene en la representación del estado y no en la del operador físico.

Tabla 2.1: Costo en memoria de algunos tipos de operadores, sólo el orden de magnitud: para la representación directa $\sim m^4 f$ y para la bipartita $\sim 2Mm^2 f_1$. La columna factor se refiere a la ganancia $m^4 f / (2Mm^2 f_1)$ relativa. Los operadores a, b, c, d son elementales sobre el orbital indicado en su subíndice. La partición en dos del sistema se realiza en $L/2$, excepto cuando se introduce el espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$, que se hace en L , separando los qbits según espín.

| Operador | m | f | M | $f_{1,2}$ | directa | bipartita | factor |
|--|-----------|--------------|-------|------------------|--------------|----------------------|--------------------|
| $O_1 = \sum_i a_i b_{i+1}$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L$ | 3 | $2^{-L/2-1} L$ | $2^L L$ | $3 \times 2^{L/2} L$ | $2^{L/2}/3$ |
| $O_2 = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma} b_{i+1,\sigma}$ | 2^L | $2^{-2L} 2L$ | 2 | $2^{-L} L$ | $2^{2L+1} L$ | $2^{L+2} L$ | 2^{L-1} |
| $O_3 = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma} b_{i\bar{\sigma}}$ | 2^L | $2^{-2L} L$ | L | 2^{-L} | $2^{2L} L$ | $2^{L+1} L$ | 2^{L-1} |
| $O_4 = \sum_{ijkl} a_i b_j c_k d_l$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L^4$ | L^2 | $2^{-L/2-4} L^4$ | $2^L L^4$ | $2^{L/2-3} L^6$ | $2^{L/2+3} L^{-2}$ |
| $O_5 = \sum_{ij} a_i b_j$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L^2$ | L | $2^{-L/2-2} L^2$ | $2^L L^2$ | $2^{L/2-1} L^3$ | $2^{L/2+1} L^{-1}$ |

2.4.2. Costo en tiempo computacional

El paso costoso para encontrar el estado fundamental (o la respuesta dinámica) de un sistema, como veremos más adelante, ocurre en la aplicación ($K \sim 100$ veces) del operador de interés (hamiltoniano) sobre un estado inicialmente aleatorio.

En la representación directa, esto corresponde a (Ecuación 2.8), que es un producto matriz vector y tenemos un costo $\sim Km^4 f$, mientras que en la bipartita (Ecuación 2.9) se tienen dos productos de matrices, M veces, el costo $\sim KMm^3(f_1 + f_2)$. El factor de ganancia, al particionar, es de $m/2M$ si todas las matrices fueran densas o de llenados similares. Este factor se vuelve más interesante si consideramos que la forma específica de (Ecuación 2.9) arroja un paralelismo perfecto en el cálculo de cada término, con lo cual se podría ganar un factor M extra. La multiplicación de matrices también se puede paralelizar usando bibliotecas de álgebra lineal altamente especializadas [48], ganándose un factor de hasta ~ 8 , teóricamente válido en ambas representaciones.

En la Tabla 2.2 presentamos los resultados de costos para varios operadores tipo. Si bien el factor de ganancia no es prometedor como en el caso del uso de memoria, vale la pena resaltar que no se pierde demasiado y que en caso de paralelizar se obtendría incluso cierta ganancia.

2.4.3. Conclusiones sobre los costos

La principal conclusión es que *conviene usar la representación bipartita*. En el caso de matrices densas (como en DMRG) la ganancia en memoria es $m^2/2M$ y en tiempo

Tabla 2.2: Costo en tiempo computacional asociado a algunos tipos de operadores, idem a [Tabla 2.1](#). La columna «directa» es ahora $m^4 f$, la «bipartita», $2Mm^3 f_1$ y «factor», $mf/(2Mf_1)$. Si se paraleliza ([Ecuación 2.9](#)) podría obtenerse un factor M extra.

| Operador | m | f | M | directa | bipartita | factor |
|--|-----------|--------------|-------|--------------|------------------|-----------|
| $O_1 = \sum_i a_i b_{i+1}$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L$ | 3 | $2^L L$ | $3 \times 2^L L$ | $1/3$ |
| $O_2 = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma} b_{i+1,\sigma}$ | 2^L | $2^{-2L} 2L$ | 2 | $2^{2L+1} L$ | $2^{2L+2} L$ | $1/2$ |
| $O_3 = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma} b_{i\bar{\sigma}}$ | 2^L | $2^{-2L} L$ | L | $2^{2L} L$ | $2^{2L+1} L$ | $1/2$ |
| $O_4 = \sum_{ijkl} a_i b_j c_k d_l$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L^4$ | L^2 | $2^L L^4$ | $2^{L-3} L^6$ | $2^3/L^2$ |
| $O_5 = \sum_{ij} a_i b_j$ | $2^{L/2}$ | $2^{-L} L^2$ | L | $2^L L^2$ | $2^{L-1} L^3$ | $2/L$ |

de cómputo $m/2M$ (o $m/2$ si se paraleliza). Para las matrices ralas (usadas en Diagonalización Exacta) la ganancia en memoria para el operador es tal que el estado es quien limita el L , encontrándonos rápidamente con una barrera exponencial de memoria 2^L , mientras que el costo computacional se mantiene similar en ambas representaciones.

2.5. Simetrías

De los cursos de mecánica cuántica sabemos que si un operador T conmuta con el hamiltoniano H , $[T, H] = 0$, entonces podemos escoger autoestados comunes a ambos. Otra forma útil de expresar este resultado es decir que si $|\nu\rangle$ y $|\nu'\rangle$ son autoestados de T de autovalores $\nu \neq \nu'$, entonces $\langle \nu | H | \nu' \rangle = 0$. Veamos:

$$\langle \nu | H | \nu' \rangle = \langle \nu | T^{-1} \nu^* H \frac{T}{\nu'} | \nu' \rangle = \frac{\nu^*}{\nu'} \langle \nu | H | \nu' \rangle = 0, \quad (2.10)$$

donde se usó que $T|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$, $\langle \nu | = \langle \nu | T^{-1} \nu^*$, y además que $\nu \neq \nu' \neq 0$, donde ν^* es el complejo conjugado de ν . En la práctica esto significa que la matriz asociada a H es diagonal en bloque si se usa una base de autoestados de T ; o lo que es lo mismo, el problema a resolver se puede dividir en varios problemas independientes y menos complejos.

Número de partículas Un ejemplo importante de simetría T es el número total de partículas $\hat{N}_p = \sum_{i=1}^L \hat{n}_i$; puesto que la mayoría de los hamiltonianos a estudiar la conservan. En este sentido, se hace natural la introducción de la base de Fock, que no es más que la base de los autoestados de \hat{n}_i . En la [Sección 2.6](#) vamos a estudiar un poco más la base de Fock.

Veamos cuánto nos ahorra el restringirnos a los estados de -digamos- $N_p = L/2$, que es el caso semilleno (para partículas sin espín) y a su vez el de mayor complejidad. El espacio completo tiene dimensión 2^L , y el restringido, $\frac{L!}{(\frac{L}{2}!)^2}$. Si tenemos en cuenta la aproximación de Stirling[49] $n! \sim \sqrt{2\pi n} (n/e)^n$, se puede verificar que la dimensión se reduce $\sim \sqrt{\pi L/2}$ veces.

Ahora podemos retomar el análisis hecho en la [Sección 2.4](#) sobre costos. En particular veamos el caso de dos sistemas de tamaño L cada uno de los cuales conserva por separado el número de partículas (situación típica al particionar en espín). Este factor encontrado arriba $\sqrt{\pi L/2}$ afecta al tamaño de la base $m \rightarrow m/\sqrt{L}$ y también al llenado $f = T_e/m^2 \rightarrow fL$, $f_1 = T_e/m \rightarrow f_1\sqrt{L}$; de forma que en el costo computacional, el factor de ganancia al biparticionar nos queda $mf/(2Mf_1) \rightarrow mf/(2Mf_1)$, o sea, un invariante. En memoria, el factor ahora es $m^2f/(2Mf_1) \rightarrow m^2f/(2Mf_1\sqrt{L})$ que significa \sqrt{L} menos ganancia que antes, siendo igualmente superior la representación bipartita.

2.5.1. Grupo de simetría

Consideremos un grupo G de d_G operadores que conmutan con H . El grupo G se caracteriza por sus representaciones irreducibles (irrep), etiquetadas por ν , de dimensión d_ν cada una [\[37\]](#). En cada irrep cada operador $g \in G$ tiene su representación matricial $\Gamma_{jj'}^{(\nu)}(g)$, donde $j, j' = 1, 2, \dots, d_\nu$. Se define:

$$\mathcal{P}_{jj'}^\nu = \frac{d_\nu}{d_G} \sum_g \Gamma_{jj'}^{*(\nu)}(g) T_g$$

donde T_g es el operador que aplica la transformación g en el espacio de Hilbert a considerar.

Para extender el resultado ([Ecuación 2.10](#)), a partir de un estado representante $|r\rangle$ arbitrario, se pueden generar cada uno de los sectores de simetría νj mediante el siguiente procedimiento: primero se obtiene $|r\nu j\rangle = \mathcal{P}_{jj}^\nu |r\rangle$, se normaliza, y luego, cada uno de sus compañeros en ν se genera usando $|r\nu j'\rangle = \mathcal{P}_{j'j}^\nu |r\nu j\rangle$. Si alguna de estas proyecciones da nula entonces no se considera. La matriz de H nos queda:

$$\langle r\nu j | H | r'\nu' j' \rangle = \frac{\langle r | \mathcal{P}_{jj}^\nu H \mathcal{P}_{jj}^\nu | r' \rangle}{\|\mathcal{P}_{jj}^\nu |r\rangle\| \|\mathcal{P}_{jj}^\nu |r'\rangle\|} \delta_{\nu\nu'} \delta_{jj'} = \frac{\langle r | \mathcal{P}_{jj}^\nu H | r' \rangle}{\|\mathcal{P}_{jj}^\nu |r\rangle\| \|\mathcal{P}_{jj}^\nu |r'\rangle\|} \delta_{\nu\nu'} \delta_{jj'} = H_{rr'}^\nu \delta_{\nu\nu'} \delta_{jj'}, \quad (2.11)$$

donde se usó que \mathcal{P}_{jj}^ν es un proyector que conmuta con H . De la expresión anterior se pueden sacar varias conclusiones:

1. La matriz de H es diagonal en bloque y sólo mezcla estados del mismo sector de simetría $j\nu$. El problema puede ser dividido en subproblemas independientes.
2. Los autovalores de la misma irrep ν tienen la misma energía, luego d_ν es la degeneración normal de H en la simetría ν , y se puede saber de antemano sólo conociendo el grupo. Demostración: $H |r\nu j\rangle = \epsilon |r\nu j\rangle \Rightarrow H |r\nu j'\rangle = H \mathcal{P}_{j'j}^\nu |r\nu j\rangle = \epsilon |r\nu j'\rangle$.
3. El conjunto de los $|r_g\rangle = T_g |r\rangle$, $g \in G$, tiene a lo sumo d_G estados independientes;

sin embargo puede mostrarse que con \mathcal{P}_{jj}^ν todos ellos generan estados $|r\nu j'\rangle$ dentro de la misma irrep ν (excepto coeficientes):

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{jj}^\nu T_g &= \mathcal{P}_{jj}^\nu = \frac{d_\nu}{d_G} \sum_{g_1} \Gamma_{jj}^{*(\nu)}(g_1) T_{g_1} T_g = \frac{d_\nu}{d_G} \sum_{g_1} \Gamma_{jj}^{*(\nu)}(g_1) T_{g_1 g} \\
&= \frac{d_\nu}{d_G} \sum_{g_2} \Gamma_{jj}^{*(\nu)}(g_2 g^{-1}) T_{g_2} \\
&= \frac{d_\nu}{d_G} \sum_{g_2 j'} \Gamma_{jj'}^{*(\nu)}(g_2) \Gamma_{j'j}^{*(\nu)}(g^{-1}) T_{g_2} \\
&= \frac{d_\nu}{d_G} \sum_{j'} \Gamma_{jj'}^{(\nu)}(g) \sum_{g_2} \Gamma_{jj'}^{*(\nu)}(g_2) T_{g_2} \\
&= \sum_{j'} \Gamma_{jj'}^{(\nu)}(g) \mathcal{P}_{jj'}^\nu.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Supongamos que los estados de la base pueden ordenarse de menor a mayor. Entonces conviene sólo usar d_ν estados (los menores) de entre los d_G generados con $|r\rangle$. Con esto se logra una importante *compresión de la base*, del orden de d_G/d_ν . En [38] se discute una idea parecida para la simetría de traslación (grupo cíclico) que hemos tratado de extender aquí.

Nótese que gracias a estos tres ingredientes nunca escribimos el estado completamente, sólo sabemos su representante y a qué simetría νj pertenece.

2.5.1.1. Grupo abeliano y cíclico

Si los elementos de un grupo conmutan entre sí, el grupo se dice que es abeliano, y tiene d_G irreps de dimensión 1 cada una; no hay degeneración, salvo accidental. Si además los elementos son potencias de un T : $g_i = T^i$, $i = 1, 2, \dots, d_G$ con $T^{d_G} = I$ el grupo se denomina cíclico. Como ejemplos de T podemos citar: la traslación en una dimensión, la reflexión, inversión de espín, electrón-hueco. Las matrices Γ de un grupo cíclico son números complejos, concretamente las d_G raíces de 1:

$$\Gamma_{11}^{(\nu)}(g) = \exp(2\pi i \nu / d_G).$$

A partir de aquí también se puede obtener el teorema de Bloch para el sólido. En particular el grupo cíclico de dos elementos se conoce como Z_2 y sus matrices son $\Gamma^{(1)} = \{1, 1\}$, $\Gamma^{(2)} = \{-1, 1\}$.

2.5.1.2. Producto directo de grupos

Si todos los operadores de un grupo A conmutan con los de otro grupo B y el único elemento en común es la identidad, entonces el producto directo de sus elementos forma un nuevo grupo $G = A \times B$ con las siguientes propiedades:

- $d_G = d_A d_B$
- Las irreps de G se obtienen como el producto directo de las irreps de A y B : $\Gamma^{(\nu_G)}(g) = \Gamma^{(\nu_A)}(g_A) \times \Gamma^{(\nu_B)}(g_B)$ donde $g = g_A \times g_B$.

Un ejemplo: inversión de espín y reflexión

- El grupo cíclico generado por la inversión de espín F es $A = \{S, I\}$ y sus matrices (números) son $\Gamma_A^{(1)} = \{1, 1\}$, $\Gamma_A^{(2)} = \{-1, 1\}$.
- El grupo generado por la reflexión de orbitales R es $B = \{R, I\}$ y sus matrices $\Gamma_B^{(1)} = \{1, 1\}$, $\Gamma_B^{(2)} = \{-1, 1\}$.
- El grupo producto directo es $G = \{SR, S, R, I\}$ y sus matrices $\Gamma^{(1 \leftrightarrow (1_A, 1_B))} = \{1, 1, 1, 1\}$, $\Gamma^{(2 \leftrightarrow (1_A, 2_B))} = \{-1, 1, -1, 1\}$, $\Gamma^{(3 \leftrightarrow (2_A, 1_B))} = \{-1, -1, 1, 1\}$, $\Gamma^{(4 \leftrightarrow (2_A, 2_B))} = \{1, -1, -1, 1\}$.

2.5.1.3. Respuesta dinámica y grupo

Como ya explicamos, la respuesta dinámica en frecuencia ([Ecuación 2.4](#)) viene dada por

$$G_{ab}(\omega) = \langle a | \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} | b \rangle$$

donde $|b\rangle = \hat{b}|0\rangle$, $|a\rangle = \hat{a}|0\rangle$ y $|0\rangle = |\nu_0 j_0 r_0\rangle$ el estado fundamental (de energía ϵ_0) encontrado usando ([Ecuación 2.11](#)) en alguna simetría $\nu_0 j_0$ con $|r_0\rangle$ un vector representante. Si intentamos calcular directamente esta fórmula tenemos algunos inconvenientes:

1. $|b\rangle$ es un estado que está fuera de la base comprimida con G (que sólo guarda la lista de representantes).
2. El vector corrección $|V\rangle = \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} |b\rangle$, se calcula resolviendo el sistema $(\omega + i\eta - H) |V\rangle = |b\rangle$ y se necesitaría la matriz completa de H .

Por tanto estaríamos perdiendo las ventajas de usar el grupo de simetría. Brindamos a continuación una posible salida.

$$G_{ab}(\omega) = \sum_{\nu r, r'} \langle a | \nu r \rangle \langle \nu r | \frac{1}{\omega + i\eta - H + \epsilon_0} | \nu r' \rangle \langle \nu r' | b \rangle$$

insertamos identidad y omitimos (por simplicidad) el índice j del respectivo sector de simetría νj .

$$\begin{aligned}
G_{ab}(\omega) &= \sum_{\nu r, r'} \langle a | \nu r \rangle \left(\frac{1}{(\omega + i\eta + \epsilon_0) \mathbf{1} - H^\nu} \right)_{rr'} \langle \nu r' | b \rangle \\
&= \sum_{\nu r, r'} \langle a | \nu r \rangle \left(\frac{1}{(\omega + i\eta + \epsilon_0) \mathbf{1} - H^\nu} \right)_{rr'} \langle \nu r' | b \rangle \\
&= \sum_{\nu r, r'} \frac{\langle a | \mathcal{P}^\nu | r \rangle}{\| \mathcal{P}^\nu | r \rangle \|} \left(\frac{1}{(\omega + i\eta + \epsilon_0) \mathbf{1} - H^\nu} \right)_{rr'} \frac{\langle r' | \mathcal{P}^\nu | b \rangle}{\| \mathcal{P}^\nu | r' \rangle \|}, \\
G_{ab}(\omega) &= \sum_{\nu} \vec{a}^\nu \cdot \frac{1}{(\omega + i\eta + \epsilon_0) \mathbf{1} - H^\nu} \cdot \vec{b}^\nu, \tag{2.13}
\end{aligned}$$

donde

$$a_r^\nu = \frac{\langle a | \mathcal{P}^\nu | r \rangle}{\| \mathcal{P}^\nu | r \rangle \|}, \quad b_r^\nu = \frac{\langle r | \mathcal{P}^\nu | b \rangle}{\| \mathcal{P}^\nu | r \rangle \|} \text{ y } \mathbf{1} \text{ es la identidad.}$$

En palabras, significa que se suman las contribuciones de cada sector de simetría, calculadas por separado. Notar que la representación vectorial de un estado $|a\rangle$ se hace proyectando a la base comprimida usando G (sólo representantes).

2.6. La diagonalización exacta

Se trabaja en el espacio de Hilbert completo. Se usa comúnmente la base de Fock, formada por los autoestados de \hat{n}_i . Un estado de Fock de L qbits se caracteriza por los números de ocupación $n_i \in \{0, 1\}$, $i = 0, 1, \dots, L-1$ de cada qbit, y tiene una correspondencia directa con un número binario de L bits:

$$|f\rangle = \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_0} |0\rangle \longleftrightarrow |n_{L-1} n_{L-2} \dots n_0\rangle.$$

Si un operador actúa sobre un estado de Fock y genera sólo un estado de Fock y -quizás- un signo fermiónico -1 , lo llamamos *operador elemental*. Nuestros operadores son combinaciones lineales de operadores elementales con no más de L^4 términos. Esto último es bastante general ya que las interacciones a estudiar son a lo sumo de dos partículas y por tanto se escriben con términos del tipo $c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l$. El signo fermiónico aparece al reordenar los operadores c^\dagger de un estado de Fock y tiene su origen en la relación de anticonmutación $c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger$. Así, después de un reordenamiento de n_s permutaciones aparece un signo $(-1)^{n_s}$.

Operaciones de simetría sobre un estado de Fock:

■ Traslación T

$$\begin{aligned}
T|f\rangle &= T \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_1^\dagger \right)^{n_1} \left(c_0^\dagger \right)^{n_0} |0\rangle \\
&= T \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_1^\dagger \right)^{n_1} \left(c_0^\dagger \right)^{n_0} T^{-1} T |0\rangle \\
&= \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-3}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_1} \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_0} |0\rangle
\end{aligned}$$

al reordenar decrecientemente los operadores aparece un signo fermiónico $(-1)^{n_0(N_p-n_0)} = (-1)^{n_0(N_p-1)}$, donde N_p es el número de partículas del estado:

$$\begin{aligned}
T|f\rangle &= (-1)^{n_0(N_p-1)} \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_0} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-3}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_1} |0\rangle, \\
T|f\rangle &\longleftrightarrow (-1)^{n_0(N_p-1)} |n_0 n_{L-1} n_{L-2} \dots n_1\rangle. \tag{2.14}
\end{aligned}$$

■ Inversión R

$$\begin{aligned}
R|f\rangle &= R \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_0} |0\rangle \\
&= \left(c_0^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_1^\dagger \right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_0} |0\rangle \\
&= (-1)^{\lfloor N_p/2 \rfloor} \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_0} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{n_1} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_{L-1}} |0\rangle \\
R|f\rangle &\longleftrightarrow (-1)^{\lfloor N_p/2 \rfloor} |n_0 n_1 \dots n_{L-1}\rangle. \tag{2.15}
\end{aligned}$$

donde la cantidad de saltos es $n_s = 1 + 2 + \dots + N_p - 1 = N_p(N_p - 1)/2$ y su paridad está determinada por la de parte entera de $N_p/2$, esto es $\lfloor N_p/2 \rfloor$.

■ Electrón-hueco Q dada por: $c_i^\dagger \rightarrow (-1)^i c_i$, $|0\rangle \rightarrow \prod_i c_i^\dagger |0\rangle$

$$\begin{aligned}
Q|f\rangle &= Q \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{n_{L-1}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{n_0} Q^{-1} Q |0\rangle \\
&= [(-1)^{L-1} c_{L-1}]^{n_{L-1}} \dots [(-1)^0 c_0]^{n_0} \cdot [c_{L-1}^\dagger c_{L-2}^\dagger \dots c_0^\dagger] |0\rangle \\
&= (-1)^{n_0(L-1)} [(-1)^{L-1} c_{L-1}]^{n_{L-1}} \dots [(-1)^1 c_1]^{n_1} \cdot [c_{L-1}^\dagger c_{L-2}^\dagger \dots (c_0^\dagger)^{\bar{n}_0}] |0\rangle \\
&= (-1)^{N_p(L-1)} \left(c_{L-1}^\dagger \right)^{\bar{n}_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger \right)^{\bar{n}_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger \right)^{\bar{n}_0} |0\rangle,
\end{aligned}$$

para el sistema semilleno $L = 2N_p$ y el signo viene dado por N_p ,

$$Q|f\rangle \longleftrightarrow (-1)^{N_p} |\bar{n}_0 \bar{n}_1 \dots \bar{n}_{L-1}\rangle. \tag{2.16}$$

- Inversión de espín F a estado de Fock de $2L$ qbits:

$$\begin{aligned}
 F|f\rangle &= F \underbrace{\left(c_{2L-1}^\dagger\right)^{n_{2L-1}} \left(c_{2L-2}^\dagger\right)^{n_{2L-2}} \dots \left(c_L^\dagger\right)^{n_L}}_{\uparrow} \underbrace{\left(c_{L-1}^\dagger\right)^{n_{L-1}} \left(c_{L-2}^\dagger\right)^{n_{L-2}} \dots \left(c_0^\dagger\right)^{n_0}}_{\downarrow} |0\rangle \\
 &= T^L \left(c_{2L-1}^\dagger\right)^{n_{2L-1}} \left(c_{2L-2}^\dagger\right)^{n_{2L-2}} \dots \left(c_0^\dagger\right)^{n_0} |0\rangle
 \end{aligned}$$

donde T^L es el operador traslación aplicado L veces. Tenemos $F \iff T^L$:

$$F|f\rangle \longleftrightarrow (-1)^{N_\uparrow(N_p-1)} |n_{L-1}n_{L-2}\dots n_0 n_{2L-1}n_{2L-2}\dots n_L\rangle. \quad (2.17)$$

2.7. El DMRG

Existen muy buenos manuales en la literatura sobre el DMRG, por lo cual nos limitamos a presentar sólo los aspectos de necesaria referencia en nuestro trabajo.

Para su presentación original basada en la matriz densidad (como fue concebido por S. White en 1992 [23, 24]), podemos citar [40, 50, 51].

Equivalentemente, el DMRG puede formularse como un método variacional que opera sobre la clase de estados cuánticos conocida como Estado Producto de Matrices (MPS, del inglés Matrix Product State). Al respecto pueden consultarse [25, 52–54].

Aquí explicamos brevemente el DMRG en su forma clásica para calcular el estado fundamental, y luego su extensión para calcular la dinámica con la técnica del vector corrección. Hacemos también referencia a la formulación Operador Producto de Matrices (MPO, del inglés Matrix Product Operator) para representar un hamiltoniano general porque la usamos en los programas.

2.7.1. La matriz densidad

En línea con [Subsección 2.2.1](#), desarrollamos el valor esperado $\langle\psi|O^S|\psi\rangle$ donde O^S sólo actúa en la parte S del sistema:

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|O^S|\psi\rangle &= \sum_{ij,i'j'} \psi_{i'j'}^* \psi_{ij} \langle i'j'|O^S|ij\rangle = \sum_{ij,i'} \psi_{i'j}^* \psi_{ij} \langle i'|O^S|i\rangle = \sum_{ii'} O_{ii'}^S \underbrace{\sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}^*}_{\rho_{ii'}^S} \\
 &= Tr[\rho^S O^S],
 \end{aligned}$$

es decir, que el operador $\rho^S = Tr_E[|\psi\rangle\langle\psi|]$ es local en S y permite medir cualquier valor esperado local. ρ^S se conoce como la *matriz densidad* reducida. El concepto de matriz densidad se introduce en la física estadística con el objetivo de caracterizar el estado físico del sistema. El operador cumple las siguientes propiedades:

- es hermitico $\rho^\dagger = \rho$,
- $Tr[\rho] = 1$,
- es semi-definido positivo (por ser Gramian [55]).

En la base de sus autoestados, $\rho^S = \sum_\alpha w_\alpha |w_\alpha\rangle \langle w_\alpha|$, de donde,

$$\langle \psi | O^S | \psi \rangle = Tr_S[\rho^S O^S] = \sum_\alpha w_\alpha \langle w_\alpha | O^S | w_\alpha \rangle. \quad (2.18)$$

Como $Tr[\rho] = \sum_\alpha w_\alpha = 1$ y $w_\alpha \geq 0$, los autovalores (decrecientes) w_α dan la probabilidad de medir el estado $|w_\alpha\rangle$ en la parte S dado que el sistema completo está en el estado $|\psi\rangle$. Si el primer autovalor $w_1 = 1$ (y los demás son nulos) entonces $|\psi\rangle$ es un estado producto (porque sólo participa un estado de la parte S): no hay entrelazamiento. Por otro lado, si w_α decae abruptamente con α , entonces el valor esperado de cualquier operador O^S puede ser aproximado usando unos pocos estados $|w_\alpha\rangle$ de la parte S , esto es, el espacio de Hilbert podría ser truncado en extremo, y esto justamente es lo que hace el DMRG.

Para caracterizar la distribución de los w_α , puede usarse la entropía de entrelazamiento de von Newmann:

$$S_{vN} = - \sum_\alpha w_\alpha \log_2 w_\alpha = -Tr \hat{\rho} \log \hat{\rho}. \quad (2.19)$$

Cuanto más baja es la entropía, mejor funciona el DMRG.

2.7.2. Algoritmo

El DMRG requiere que se haya establecido un orden unidimensional de los L orbitales y en cada momento trabaja con un sistema bipartito: cada parte está formada por un *bloque* (secuencia contigua de orbitales). La idea es comprimir (renormalizar, decimar) el espacio de Hilbert de cada bloque basado en la matriz densidad reducida. Para esto se necesita una aproximación al estado global $|\psi\rangle$ que se quiere calcular (el fundamental) que nos permita generar la ρ de cada bloque. Siguiendo a White y Chan en su trabajo reciente [53], podemos resumir los tres pasos conceptuales del algoritmo como:

1. *Definición de bloques.* Se especifican los dos bloques de orbitales S y E , con los operadores intermediarios que hagan falta, para después construir el hamiltoniano global:

$$H = \sum_{\alpha=1}^M A_\alpha^S \times B_\alpha^E, \quad (2.20)$$

con A_α^S un operador de S y B_α^E un operador de E (Figura 2.1). También se define una aproximación inicial para el estado fundamental ψ (aleatoria si no hay algo mejor).

2. *Resolución.* Se encuentra el estado fundamental de H , en general con un algoritmo iterativo que usa la aproximación inicial dada para $|\psi\rangle$.
3. *Decimación.* Para cada bloque: se calcula la matriz densidad reducida ρ , se diagonaliza completa, y se escogen los m autoestados $|w_\alpha\rangle$ de autovalor más grande como nueva base. Luego todos los operadores se llevan a la nueva base: $O \rightarrow O_{\alpha\alpha'} = \langle w_\alpha | O | w_{\alpha'} \rangle$.

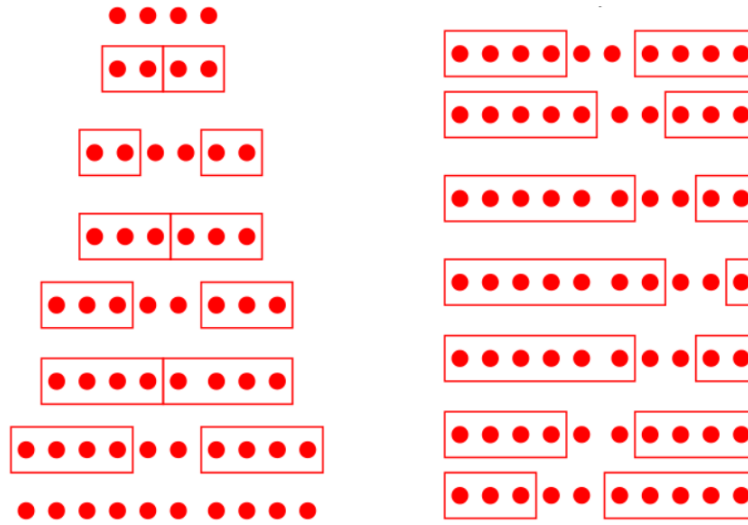


Figura 2.1: Esquema de las iteraciones DMRG. A la izquierda el crecimiento, a la derecha los barridos.

El paso 1 lleva el mayor esfuerzo de programación, por tener que definir los operadores necesarios (listas A^S y B^E) para la construcción de H . Volveremos sobre este punto en la Subsección 2.7.3. Un tratamiento muy elegante lo constituye el uso de los MPO, ver Subsección 2.7.4. Por otro lado, es importante señalar que no se debe construir el operador global H de (Ecuación 2.20) en representación directa, sino trabajar con la bipartición como explicamos en la Sección 2.4, con los ya discutidos ahorros de memoria y de cómputo. El espacio de trabajo en cada bloque nuevo es de dimensión $2m$ debido a la unión de un bloque (m estados) con un qbit (2 estados) según el esquema de la Figura 2.1.

El paso 2 es el costoso, por ser el único que trabaja en el espacio completo $S \cup E$. De la Sección 2.4 sabemos que el costo viene dado por $2KM(2m)^3$. Es importante disminuir la cantidad de iteraciones K haciendo una buena predicción de ψ en el paso 1, y también bajar M escribiendo la (Ecuación 2.20) lo más compacta posible (esto se logra usando operadores complementarios, ver Subsección 2.7.3). El parámetro de mayor repercusión es m , sobre el que discutimos más abajo.

La enorme compresión del espacio ocurre en el paso 3: del espacio de Hilbert exponencialmente grande sólo nos quedamos con m estados. Sin embargo, esta aproximación tiene un parámetro de control: sabemos que los pesos w_α cumplen $\sum_\alpha w_\alpha = 1$, por tanto $\delta = 1 - \sum_{\alpha \leq m} w_\alpha$ es el peso descartado y es una buena medida del error que cometemos en la renormalización. Típicamente usamos un m que mantiene el peso descartado por debajo de 10^{-10} . Por último, cabe señalar que en este paso se trabaja siempre con una parte del sistema que no tiene más que $2m$ estados y que por lo tanto los costos no son comparables con el paso 2 que trabaja en un espacio de $(2m)^2$.

Al fijar el peso descartado y el sistema físico, parecería que no tenemos mucho que mejorar respecto al m . Sin embargo, esto no es definitivo: todavía tenemos libertad para ordenar los orbitales, o incluso para trabajar con otros orbitales. Al tratar los problemas de impureza ([Sección 3.3](#)) veremos cómo esta idea se explota.

La cantidad de estados necesarios m está estrechamente relacionada con el entrelazamiento entre los bloques. Podemos hallar un estimado con la entropía: si suponemos estados equiprobables (sería la peor distribución de los pesos w_α) $m \sim 2^{S_{vN}}$. La ventaja es que hay resultados generales sobre el entrelazamiento para hamiltonianos locales en dimensión espacial d : la ley de área establece que la entropía de una parte va como el área (y no como el volumen como la entropía termodinámica), con correcciones logarítmicas si el sistema es crítico [[25](#), [56](#)]. Esto significa que los hamiltonianos unidimensionales son solubles con DMRG o, si el sistema es crítico, al menos se puede llegar a L grandes porque $m \sim 2^{c \log L} \sim L^c$ es polinomial en L .

Por último mencionamos que se pueden tener en cuenta las simetrías dentro del DMRG. Veamos el caso del número de partículas. Si el estado global $|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$ tiene N_p partículas entonces $\psi_{ij} = \psi_{ij} \delta_{N_i+N_j, N_p}$ donde N_i es el número de partículas del estado $|i\rangle$. La matriz reducida es:

$$\rho_{ii'}^S = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}^* = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}^* \delta_{N_i+N_j, N_p} \delta_{N_{i'}+N_j, N_p} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}^* \delta_{N_i N_{i'}},$$

o sea, es diagonal en bloques de igual N_i . Diagonalizando cada bloque N_i por separado, los autoestados $|w_\alpha\rangle$ de $\rho_{ii'}^S$ así obtenidos también tienen N_i partículas, con lo cual la renormalización mantiene la simetría.

2.7.3. Operadores complementarios

Respecto al paso 1 del algoritmo DMRG, habíamos mencionado la dificultad en la programación de los operadores de cada partición. Por supuesto, esto se refiere a los casos donde el hamiltoniano tiene varios términos y no sólo a primeros vecinos. Aquí estamos apuntando al hamiltoniano general ([Ecuación 1.2](#)):

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l.$$

Como indicio podemos mencionar que, mientras que un programa DMRG para hamiltonianos sencillos se encuentra en innumerables páginas web, hay sólo unas pocas implementaciones disponibles [53], alrededor de cuatro, para el problema (Ecuación 1.2). Estas implementaciones incluyen evolución temporal, pero hace sólo pocos meses salió un trabajo [57] donde incluyen el cálculo de la respuesta dinámica usando el vector corrección.

Además del signo fermiónico, la dificultad aparece al tener en cuenta que, dentro de un bloque, en la base renormalizada el producto de dos operadores no es el producto de sus matrices porque la base no es completa. En principio habría que llevar todos los operadores c_i , c_i^\dagger , sus dúos, tríos y cuartetos en cada bloque. Estas $\sim L^4$ matrices de $4m^2$ en cada partición saturarían rápidamente la memoria de la computadora, además del costo de calcular los L^4 términos cada vez. Como alternativa, se implementa la técnica de operadores complementarios, que en esencia se trata de generar solamente las cantidades requeridas para H en cada bloque. Por ejemplo, para una partición en el sitio l_p , el término

$$\begin{aligned} \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j &= \sum_{i,j \leq l_p} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i,j > l_p} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i \leq l_p, j > l_p} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i > l_p, j \leq l_p} t_{ij} c_i^\dagger c_j \\ &= h^1 + h^2 + \sum_{i \leq l_p, j > l_p} (t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ji} c_i c_j^\dagger) \\ &= h^1 + h^2 + \sum_{i \leq l_p} c_i^\dagger \underbrace{\sum_{j > l_p} t_{ij} c_j}_{\bar{c}_i} - \sum_{i \leq l_p} c_i \underbrace{\sum_{j > l_p} t_{ji} c_j^\dagger}_{\bar{c}_i^\dagger} \\ &= h^1 + h^2 + \sum_{i \leq l_p} c_i^\dagger \bar{c}_i - \sum_{i \leq l_p} c_i \bar{c}_i^\dagger. \end{aligned}$$

En memoria, sólo hay que llevar $1 + 2l_p$ operadores en cada bloque en lugar de $l_p^2 + 2l_p$; y en costo tenemos $M = 2 + 2l_p \sim L$ términos en lugar de $M \sim L^2$ con una ganancia importante del orden de L . Un tratamiento análogo para el término $\sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l$ nos permite comprimir de $\sim L^4$ operadores a $\sim L^2$. En la Sección A.2 presentamos nuestro propio desarrollo.

2.7.4. Operador producto de matrices

El MPO de H no es más que la forma iterativa por sitio de construir los operadores complementarios y finalmente H . Como veremos, toda la información se compacta en

una matriz de operadores asociada a cada sitio. Esta elegante formulación local permite simplificar mucho la programación: el nivel de abstracción es tal que el mismo programa resuelve un hamiltoniano de química cuántica o un simple modelo de primeros vecinos.

Aunque hacemos nuestro propio tratamiento general, como ejemplo vamos a ir usando un hamiltoniano sencillo:

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} c_i^\dagger c_{i+1} + h.c. \quad (2.21)$$

con condiciones abiertas, no hay signo fermiónico.

Para construir el MPO necesitamos:

1. *Biparticiones.* La expresión del hamiltoniano H en el sistema bipartito: con l orbitales a la izquierda (bloque S_l); y $L - l$ a la derecha (bloque E_l), para $l = 1, 2, \dots, L - 1$. Esto es, saber expresar

$$H = \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{S_l} \times B_{\alpha}^{E_l} \quad (2.22)$$

con $A_{\alpha}^{S_l}$ un operador de S_l y $B_{\alpha}^{E_l}$ un operador de E_l .

- a) En nuestro ejemplo ([Ecuación 2.21](#)):

$$H = H^{S_l} \times I^{E_l} + I^{S_l} \times H^{E_l} + c_l^\dagger \times c_{l+1} + c_l \times c_{l+1}^\dagger.$$

Los operadores necesarios en la parte izquierda son $A^{S_l} = \{H, I, c_l^\dagger, c_l\}$ y en la parte de derecha $B^{E_l} = \{I, H, c_{l+1}, c_{l+1}^\dagger\}$, respectivamente.

- b) Para un hamiltoniano general tipo ([Ecuación 1.2](#)) está claro que no puede haber más que $\sim L^4$ términos en ([Ecuación 2.22](#)), y siendo más exigentes, se muestra que la cantidad de términos va como $\sim L^2$ para cualquier partición, ver [Subsección 2.7.3](#).

2. *Recurrencia.* A partir de los operadores A^{S_l} de S_l y los operadores w^{l+1} del orbital $l + 1$, saber obtener los operadores $A^{S_{l+1}}$. Esto es:

$$A_{\alpha}^{S_{l+1}} = \sum_{\alpha'} A_{\alpha'}^{S_l} \times w_{\alpha'\alpha}^{l+1}.$$

- a) La recurrencia para los $B^{E_{l+1}}$ queda automáticamente determinada por la matriz de operadores w^{l+1} :

$$H = \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{S_{l+1}} \times B_{\alpha}^{E_{l+1}} = \sum_{\alpha} A_{\alpha'}^{S_l} \times w_{\alpha'\alpha}^{l+1} \times B_{\alpha}^{E_{l+1}} = \sum_{\alpha'} A_{\alpha'}^{S_l} \times B_{\alpha'}^{E_l},$$

de donde

$$B_{\alpha}^{E_l} = \sum_{\alpha'} w_{\alpha\alpha'}^{l+1} \times B_{\alpha'}^{E_{l+1}}.$$

w es el MPO que buscamos.

b)

En nuestro ejemplo (Ecuación 2.21):

$$H^{S_{l+1}} = H^{S_l} \times I^{l+1} + c_l^{\dagger} \times c_{l+1} + c_l \times c_{l+1}^{\dagger}$$

$$I^{S_{l+1}} = I^{S_l} \times I^{l+1}$$

$$\left(c_{l+1}^{\dagger}\right)^{S_{l+1}} = I^{S_l} \times c_{l+1}^{\dagger}$$

$$(c_{l+1})^{S_{l+1}} = I^{S_l} \times c_{l+1}$$

que se resume en la relación matricial:

$$\begin{pmatrix} H^{S_{l+1}} \\ I^{S_{l+1}} \\ \left(c_{l+1}^{\dagger}\right)^{S_{l+1}} \\ (c_{l+1})^{S_{l+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^{S_l} & I^{S_l} & c_l^{\dagger} & c_l \end{pmatrix} \odot \underbrace{\begin{pmatrix} I^{l+1} & 0 & c_{l+1} & c_{l+1}^{\dagger} \\ 0 & I^{l+1} & 0 & 0 \\ 0 & c_{l+1}^{\dagger} & 0 & 0 \\ 0 & c_{l+1} & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{w^{l+1}}.$$

El conjunto de las matrices w^l para $l = 1, \dots, L$ es el MPO de H y es toda la información que necesitamos del problema, dado que la sucesiva aplicación de los w^l genera cualquier bipartición. Además, cada operador de w_l es una matriz de 2×2 porque está definido en un solo sitio, lo cual significa que el MPO se puede escribir exactamente para cualquier hamiltoniano sin ninguna dificultad. Esta sería la única entrada para nuestro programa DMRG.

2.7.5. Vector corrección en el DMRG

La extensión de vector corrección para el DMRG [44, 47] consiste en apuntar, durante la renormalización, no sólo al estado fundamental del sistema $|E_0\rangle$ sino también al vector corrección $|V_i\rangle$ asociado a la frecuencia de excitación ω_i (y su vecindad); esto es:

$$(\omega_i + i\eta - H_{imp} - E_0) |V_i\rangle = c^{\dagger} |E_0\rangle, \quad (2.23)$$

donde se ha introducido un ensanchamiento lorentziano η para lidiar con los polos que aparecen en la densidad de estados por tratarse de un sistema finito.

En la implementación concreta, los estados a apuntar son seis: el fundamental $|E_0\rangle$, la excitación $c^{\dagger} |E_0\rangle$, y las partes reales e imaginarias de dos vectores corrección (uno

para cada extremo del intervalo de ω a estudiar). A cada estado se le da un peso para construir la matriz densidad; usamos $p_1 = 0,4$; $p_2 = 0,2$ y $p_{3,4,5,6} = 0,1$ para los otros 4, respectivamente (el resultado final es independiente de la distribución de los pesos al crecer el m del DMRG). La matriz densidad es:

$$\rho = \sum_j p_j |t_j\rangle \langle t_j|,$$

donde $|t_j\rangle$ son los 6 estados y p_j los pesos. Con esta matriz densidad se genera la matriz reducida $\rho^S = \text{Tr}_E \rho$ para usar en la renormalización.

De esta manera se obtiene una representación adecuada de los operadores, que permite calcular las propiedades de la excitación en la vecindad de energías ω_i ; particularmente se puede calcular la función de Green.

Por completitud, mencionemos que la dinámica dentro del DMRG además se puede calcular mediante una extensión del algoritmo de Lanczos [58], haciendo evolución temporal y posterior transformada de Fourier [59], o usando polinomios de Chebyshev, ver por ejemplo [60].

2.8. Códigos implementados en esta tesis

Como parte del trabajo de tesis y en relación con este capítulo, se implementaron dos software de libre acceso: ED (<https://sourceforge.net/projects/ed-sym>) y DMRG-químico (<https://sourceforge.net/projects/dmrg-qc>) correspondientes a la Diagonalización Exacta y el DMRG, respectivamente. Ambos se programaron en el lenguaje c++; tratando de usar sus potencialidades de abstracción (herencia, clases abstractas, genericidad (template), lambda expressions) para generar programas relativamente fáciles de leer y de modificar o extender, y que en general intentan seguir el paradigma de dividir cada problema en sub-problemas sencillos. A la vez, el c++ es conocido por sus ejecutables muy eficientes que es el principal objetivo práctico. Los programas dependen de la biblioteca de álgebra lineal armadillo [48].

Además de ser parte central en esta tesis, podemos citar las siguientes aplicaciones:

1. En los cálculos de la tesis de maestría «Optimización de la renormalización numérica utilizando información cuántica: aplicación a modelos de una impureza interactuante» de Diego Flores Marozzi del Instituto Balseiro, para resolver un hamiltoniano general tipo (Ecuación 1.2) y estudiar distintas bases de orbitales para el problema de impureza con el objetivo de mejorar el DMRG, incluyendo la variante de vector-corrección.
2. En los cálculos de la tesis de maestría «Dualidades en el efecto Hall cuántico fraccionario» de Yasuo Oda del Instituto Balseiro, para resolver otro hamiltoniano

general tipo (Ecuación 1.2) y calcular el entrelazamiento en función del tamaño de bloque.

2.8.1. Programa de Diagonalización Exacta

Siguiendo lo expuesto en el capítulo, representamos cada estado de Fock como un número binario de L bits y cada operador elemental como una función que recibe el estado, lo modifica, y devuelve 0 (si es nulo el resultado) ó ± 1 indicando el signo fermiónico. Encima implementamos la composición genérica de operadores. Con esto resulta intuitivo definir un hamiltoniano cualquiera, lo mismo en representación directa que bipartita, ver ejemplo a continuación.

Dada la base, el programa puede generar la representación matricial rala de un operador (para esto usa algoritmos muy eficientes de búsqueda en tabla hash) y encontrar el estado fundamental (o todos los estados) y cualquier valor esperado sin mayor dificultad. También la respuesta dinámica.

Adicionalmente, implementamos la simetría del número de partículas (para generar la base) y la teoría de grupos expuesta anteriormente. Como ejemplo representativo, usando nuestra biblioteca <https://sourceforge.net/projects/ed-sym>, resolvimos un anillo de Hubbard de 16 sitios (32 qbits) usando 15 horas de una computadora corriente. Nótese que el problema está en el límite de lo posible porque solamente representar un estado necesita 2^{32} coeficientes reales que son $2^{35}\text{bytes} = 2^5\text{Gb} = 32\text{Gb}$ de memoria. Esto se logra, con la teoría de grupos, usando las siguientes simetrías combinadas: número de partículas de cada espín, traslación con momento $k = 0$, inversión de espín, reflexión, electrón-hueco. En el Algoritmo 2.1 mostramos el programa, el cual podría leerse sin más explicación y cabe en una página (por estar basado en las subrutinas generales implementadas).

2.8.2. Programa DMRG

Implementamos la solución con DMRG del hamiltoniano general (Ecuación 1.2), esto es, el cálculo del estado fundamental y de la respuesta dinámica en frecuencia. Consideramos dos variantes: la primera usando directamente las expresiones de operadores complementarios (Subsección 2.7.3) y la segunda usando MPO (Subsección 2.7.4).

El DMRG se programa como una clase en c++ para encontrar el estado fundamental, y luego el DMRG con vector corrección se genera mediante herencia, añadiendo unas pocas líneas para modificar el cálculo de la matriz densidad, ver Subsección 2.7.5.

Los cálculos presentados en esta tesis se hicieron con la primera variante. Para obtener mejores rendimientos, además de los comentarios al respecto en la Sección 2.7, trabajamos con la representación bipartita, usamos la predicción de la función de onda

Algoritmo 2.1 Programa para resolver el anillo de Hubbard de 16 sitios con diagonalización exacta, usando grupo de simetría (traslación, inversión de espín, reflexión, electrón-hueco). Nótese la simpleza y versatilidad del código, debido al nivel de abstracción implementado en nuestra biblioteca ED.

```

QOperator HubbardHamiltonian(int L,double U,bool periodic=false)
{
    QOperator H;
    for(int i=0;i<L-1+periodic;i++)
    {
        H.Add(Create(i      ) * Destroy((i+1)%L)      ,1);
        H.Add(Create((i+1)%L ) * Destroy(i)            ,1);
        H.Add(Create(i+L      ) * Destroy((i+1)%L+L)    ,1);
        H.Add(Create((i+1)%L+L) * Destroy(i+L)          ,1);
    }
    for(int i=0;i<L;i++)
        H.Add(Create(i ) * Destroy(i ) *
              Create(i+L) * Destroy(i+L) ,U);
    return H;
}

void TestHubbardHamiltonian()
{
    const int L=16;
    int nPart=L/2;
    FockBasis<L> b1=FockBasisFixedCharge<L>(nPart);

    auto Tl=TranslationOp<2*L>(L);
    auto Gsf=Z2_Group<2*L>( Tl );
    auto Refl=TensorPow<L,2,ElementaryOp<L>> ( ReflectionOp<L> );
    auto Gr=Z2_Group<2*L>( Refl );
    auto Geh=Z2_Group<2*L> ( ParticleHoleOp<2*L> );
    auto T1=TranslationOp<L>(1);
    auto Trasl=TensorPow<L,2>( T1 );
    auto Gt=CyclicGroupPow<2*L>(Trasl, L);

    auto G=Gsf.DirectProd(Gr).DirectProd(Geh).DirectProd(Gt);
    FockBasis<2*L> b=TensorProd(b1,b1,G);
    auto H=HubbardHamiltonian(L,1.0,true).toMatrix(b,G);

    Vector wf(b.Size());
    wf.randu();
    cout<<"ener="<<Diagonalize(H,wf).ener0<<endl;
}

```

durante el crecimiento y los barridos, e incluimos perturbaciones locales para evitar los mínimos no globales.

La variante MPO fue implementada hace muy poco y, por su formalismo, es más versátil. Le incluimos la simetría de número de partícula (y cualquier simetría aditiva localmente), también electrón-hueco, y la paralelización mencionada en la [Sección 2.4](#) para la bipartición. Logramos resolver sistemas mucho más complejos (que los tratados con la primera variante) en la mencionada tesis de Yasuo Oda. Todavía no probamos el rendimiento para las impurezas DMFT.

Pueden verse los ejemplos de uso en el sitio web mencionado <https://sourceforge.net/projects/dmrg-qc>.

Capítulo 3

Teoría de Campo Medio Dinámico

3.1. Introducción

La Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) es uno de los métodos más usados actualmente para estudiar sistemas electrónicos fuertemente correlacionados, llegando a realizar predicciones cuantitativas en ciertos materiales, al combinarse con DFT [61]. Tiene la gran ventaja de describir, bajo un mismo tratamiento, la cuasipartícula metálica (bien descrita por técnicas de una partícula) y las bandas de Hubbard (bien descritas en el límite atómico) [8]. Esto significa que logra captar simultáneamente el carácter itinerante y localizado de los electrones en un cristal. Es por lo tanto una aproximación adecuada para entender y caracterizar la transición metal-aislante de Mott al aumentar la interacción, y para ahondar en el entendimiento de los modelos de materiales correlacionados.

El DMFT es exacto en los tres casos límites: no interactuante, atómico, y número de coordinación de red muy grande.

La técnica se basa en hacer corresponder el problema de la red al de una impureza: un fragmento interactuante conectado a un baño no interactuante, de forma que el efecto dinámico de toda la red sobre el fragmento es reemplazado por el baño. Esta correspondencia debe cumplir que las magnitudes dinámicas locales, tanto la función de Green como la autoenergía, coinciden para ambos problemas, lo cual define un proceso iterativo para determinar el baño. Una vez convergido este, se pueden medir cantidades locales estáticas y dinámicas.

En este capítulo presentamos el DMFT, así como su extensión para el caso multiorbital, y el de varios sitios (cluster-DMFT). Pueden consultarse las revisiones [1, 8, 12] y [3], respectivamente.

Proponemos un tratamiento unificado para las mencionadas extensiones del DMFT, relacionado con la publicación 5 de la tesis, que sirve de base para los dos capítulos siguientes donde se resuelven los modelos objeto de estudio.

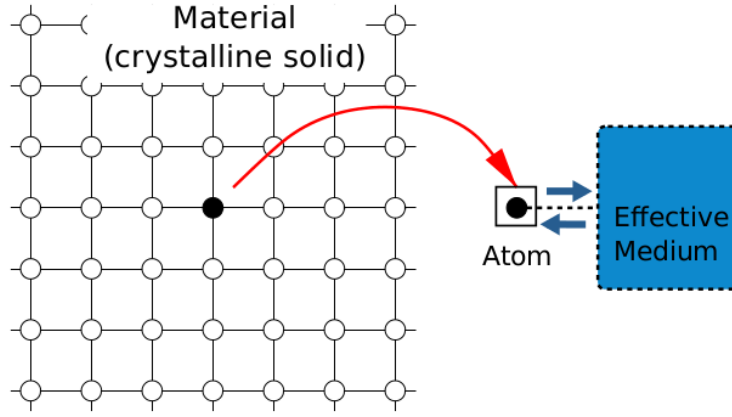


Figura 3.1: Esquema de la idea original del DMFT. Tomado de [1].

3.2. Formulación general

Con la intención de presentar un tratamiento unificado para hamiltonianos multi-orbital o multi-sitios (cluster) en la red, comenzamos por interpretar la red como una super-red tal que:

1. La interacción \hat{V} es local y está completamente contenida en la celda unidad: $\hat{V} = \sum_i \hat{V}_i$, donde i es el índice de celda.
2. El hamiltoniano no interactuante \hat{H}^0 es caracterizado por su función de Green matricial en la celda $G_0(\omega \mathbf{1} - T)$; siendo $T = (t_{IJ})$ los coeficientes de la parte local \hat{h}_i^0 de \hat{H}^0 : $\hat{h}_i^0 = \sum_{IJ} t_{IJ} c_{iI\sigma}^\dagger c_{iJ\sigma}$, donde $c_{iI\sigma}^\dagger$ crea un electrón en la celda i , en el “orbital” local $I = 1, 2, \dots, N_c$ con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Estos dos puntos definen completamente nuestro problema a través de los parámetros: \hat{V}_i , G_0 , T . Nótese que G_0 y T son cantidades de partícula libre típicamente bien conocidas para un problema dado en la red.

La idea clave del DMFT es despreciar la autoenergía Σ entre celdas diferentes i y j en la red, esto es, considerar solamente la autoenergía local: $\Sigma_{ij}(\omega) \approx \Sigma(\omega)\delta_{ij}$. De esta manera, estamos perdiendo correlaciones espaciales mientras que hacemos un buen tratamiento de las correlaciones dinámicas. El punto relevante es que el problema se vuelve manejable, como se verá en lo que sigue. Tengamos presente que G_0 , T , y Σ son matrices de $N_c \times N_c$ para la solución simétrica en espín, y matrices de $2N_c \times 2N_c$ en el caso general.

La función de Green local ahora es dada por [1]:

$$G(\omega) = G_0(\omega \mathbf{1} - T - \Sigma(\omega)), \quad (3.1)$$

lo cual define la *condición de autoconsistencia* para las matrices G and Σ , puesto que ambas además deben cumplir la ecuación de Dyson (Subsección 2.2.3) con cierta hibri-

dización $\Gamma(\omega)$ a determinar. Con esto, el problema en la red puede hacerse corresponder a un problema auxiliar de impureza que tenga las mismas magnitudes locales $G(\omega)$ y $\Sigma(\omega)$. Este problema de impureza debe determinarse iterativamente; su hamiltoniano se puede escribir:

$$H_{imp} = \hat{h}_0^0 + \hat{V}_0 + H_b, \quad (3.2)$$

donde la parte no interactuante H_b representa el baño:

$$H_b = \sum_{IJq\sigma} \lambda_q^{IJ} b_{Iq\sigma}^\dagger b_{Jq\sigma} + \sum_{IJq} v_q^{IJ} \left[b_{Iq\sigma}^\dagger c_{0J\sigma} + H.c. \right], \quad (3.3)$$

$b_{Iq\sigma}^\dagger$ corresponde al operador de creación para el sitio de baño q , asociado al “orbital” I y espín σ (ver [Figura 3.2](#)). El algoritmo es:

- (i) Comenzar con $\Sigma(\omega) = 0$,
- (ii) Calcular la función de Green:

$$G(\omega) = G_0 (\omega \mathbf{1} - T - \Sigma(\omega)), \quad (3.4)$$

- (iii) Calcular la hibridización:

$$\Gamma(\omega) = \omega \mathbf{1} - T - \Sigma(\omega) - [G(\omega)]^{-1}, \quad (3.5)$$

- (iv) Encontrar un hamiltoniano H_{imp} con hibridización $\tilde{\Gamma}(\omega)$ que aproxime a $\Gamma(\omega)$. La hibridización $\tilde{\Gamma}(\omega)$ es caracterizada por los parámetros $\Upsilon_q = (v_q^{IJ})$ y $\Lambda_q = (\lambda_q^{IJ})$ de H_{imp} a través de (ver [Ecuación 2.5](#), las matrices Υ_q y Λ_q son reales y Λ_q es simétrica):

$$\tilde{\Gamma}(\omega) = \sum_q \Upsilon_q \cdot [\omega \mathbf{1} - \Lambda_q]^{-1} \cdot \Upsilon_q. \quad (3.6)$$

- (v) Calcular la función de Green local en la impureza $G_{imp}(\omega)$ para el hamiltoniano H_{imp} .

- (vi) Obtener la autoenergía:

$$\Sigma(\omega) = \omega \mathbf{1} - T - [G_{imp}(\omega)]^{-1} - \tilde{\Gamma}(\omega). \quad (3.7)$$

Volver a (ii) hasta lograr convergencia: $G_{imp} = G$ no cambian con la iteración.

El paso (iv) es un problema de ajuste para los Υ_q y Λ_q , donde podemos usar las simetrías generales de la función de hibridización matricial. Si Γ puede ser diagonalizada usando la misma rotación unitaria R para todo ω entonces obtenemos (como máximo) N_c ajustes independientes. Esto puede verse de la ([Ecuación 3.6](#)) al aplicar R :

$$R^\dagger \cdot \tilde{\Gamma}(\omega) \cdot R = R^\dagger \cdot \left(\sum_q \Upsilon_q \cdot [\omega I - \Lambda_q]^{-1} \cdot \Upsilon_q \right) \cdot R, \quad (3.8)$$

$$\tilde{\Gamma}^D(\omega) = \sum_q \Upsilon_q^D \cdot [\omega \mathbf{1} - \Lambda_q^D]^{-1} \cdot \Upsilon_q^D, \quad (3.9)$$

donde usamos el super-índice D para enfatizar que estas matrices son diagonales, y $M^D = R^\dagger \cdot M \cdot R$ donde M es una matriz de $N_c \times N_c$. En esta nueva base (a veces referida como base de orbitales moleculares), tenemos que ajustar $\Gamma_{11}^D(\omega)$ usando la expresión (Ecuación 3.9) para $\tilde{\Gamma}_{11}^D(\omega)$ la cual depende de los parámetros $(\Upsilon_q^D)_{11}$ y $(\Lambda_q^D)_{11}$, y la misma tarea para $\Gamma_{22}^D(\omega)$, etc. Una vez que hacemos estos ajustes independientes, regresamos los parámetros a la base original a través de $M = R \cdot M^D \cdot R^\dagger$.

Para el sistema semilleno también podríamos tener la simetría electrón-hueco, dando una conexión entre $G^>(\omega)$ y $G^<(\omega)$ (comúnmente $G^>(\omega) = G^<(\omega)$). Esto tiene dos implicaciones: que sólo hay que calcular $G^>(\omega)$ para $\omega > 0$, y que el ajuste se hace con la mitad de los parámetros pues $\Gamma(-\omega) = \Gamma(\omega)$ y entonces $\Lambda_{-q} = -\Lambda_q$, y $\Upsilon_{-q} = \Upsilon_q$.

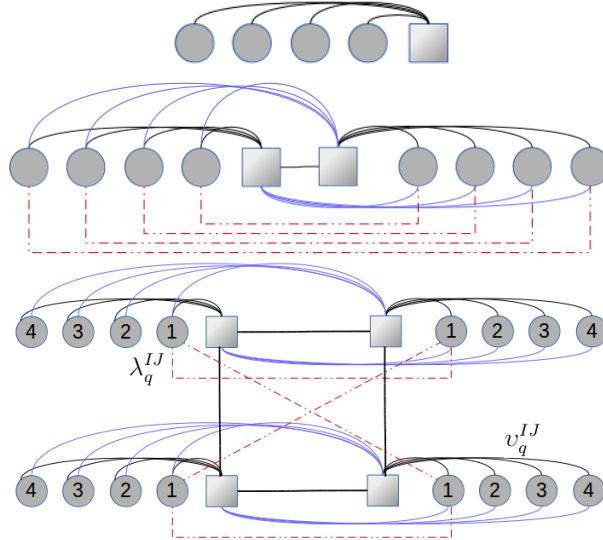


Figura 3.2: Esquema del problema de impureza para el celular-DMFT de 1, 2 y 4 sitios. Los círculos (cuadrados) representan sitios no-interactuantes (interactuantes), y las líneas corresponden a las hibridizaciones. El grafo se duplica por el grado de libertad de espín.

La parte dura del algoritmo se lleva a cabo en el paso (v), donde hay que calcular la dinámica de un problema complejo de muchos electrones (ver Figura 3.2). La representación gráfica del problema se muestra en la Figura, excepto que se duplica el grafo por el grado de libertad de espín, generando dos cadenas idénticas, una para cada espín. Una discusión más detallada sobre este problema de impureza tiene lugar en la Sección 3.3.

Nosotros usamos el vector-corrección del DMRG, como se explica en Subsección 2.7.5, para calcular la función de Green, donde la excitación es en este caso $c_{0I\sigma}^\dagger |E_0\rangle$. Si lla-

mamos $|CV_r\rangle$ al vector corrección asociado a la frecuencia ω_r (y su vecindad) tenemos:

$$(\omega_r + i\eta - H_{imp} + E_0) |CV_r\rangle = c_{0I\sigma}^\dagger |E_0\rangle,$$

y la función de Green es: $G_{JI\sigma}^>(\omega) = \langle E_0 | c_{0J\sigma} | CV_r \rangle$, $G_{JI\sigma}(\omega) = G_{JI\sigma}^>(\omega) + G_{JI\sigma}^<(-\omega)$. Aquí ω_r con $r = 1, 2, \dots, N_\omega$ es una grilla que cubre las frecuencias con densidad de estados, típicamente $N_\omega = 40-50$ y $\omega_r \in [-4, 4]$.

3.2.1. Periodización para el cluster-DMFT

Después de convergido el ciclo DMFT, una cantidad matricial $Q^c(\omega)$ calculada en el cluster se periodiza en la red [62] para obtener su dependencia en \mathbf{k} :

$$Q^p(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{N_c} \sum_{ij} Q_{ij}^c(\omega) \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}],$$

donde \mathbf{k} está definido en la primera zona de Brillouin de la red original (no la superred) y \mathbf{r}_{ij} es el vector que conecta los sitios i, j dentro del cluster. Q^c debe ser una cantidad aproximadamente local para que la suma de arriba sea una buena aproximación de la suma por todos los sitios de red (transformada de Fourier, que sí corresponde al valor exacto de $Q^p(\omega, \mathbf{k})$). Por ejemplo, para un aislante, la cantidad Q^c podría ser la función de Green que es casi local a los sitios, mientras que para un metal poco correlacionado, Q^c podría ser la autoenergía Σ .

Usamos la función cumulante:

$$M^c(\omega) = [\omega + i\eta - \Sigma^c(\omega)]^{-1},$$

como cantidad local, que es buena para describir un amplio rango de interacciones. Esto último está avalado por experimentos numéricos y está basado en que M^c tiene la forma funcional de la función de Green atómica [62]. A partir de la periodización $M^p(\omega, \mathbf{k})$ tenemos

$$\Sigma^p(\omega, \mathbf{k}) = [\omega + i\eta - M^p(\omega, \mathbf{k})]^{-1},$$

$$G^p(\omega, \mathbf{k}) = [\omega + i\eta - \Sigma^p(\omega, \mathbf{k})]^{-1}.$$

Por último, podemos calcular la función de Green local:

$$G^p(\omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} G^p(\omega, \mathbf{k}),$$

donde \mathcal{V} es el volumen de la red.

3.3. Impureza efectiva

Prácticamente todo el costo del algoritmo DMFT está en el cálculo de las propiedades dinámicas de la impureza, ver [Figura 3.2](#). Para el DMFT de un sitio y un orbital por sitio, el modelo efectivo que se obtiene es también conocido como problema de impureza de Anderson (SIAM, de sus siglas en inglés single impurity Anderson model), y representa el caso más simple de impureza al tener un solo sitio interactuante. Sin embargo, el SIAM está lejos de ser un problema sencillo dada su naturaleza no separable.

Cuando el DMFT se aplica a problemas con más de un orbital o más de un sitio (variante cDMFT) la complejidad de la impureza aumenta considerablemente, al aumentar la cantidad de sitios interactuantes y con ello el entrelazamiento en general, que es lo que finalmente limita el desempeño del DMRG.

Ya mencionábamos en la [Sección 2.7](#) que contamos con cierta libertad para tratar de disminuir el entrelazamiento de un problema dado: el orden de los orbitales y la base de orbitales. Tradicionalmente [\[4, 21, 63, 64\]](#) el hamiltoniano H_{imp} de la [\(Ecuación 3.2\)](#) se llevaba, mediante cambio de orbitales, a un hamiltoniano local o de primeros vecinos en una dimensión (geometría de cadena) porque la implementación del DMRG es más fácil (el paso 1) y porque se suponía que al parecerse a un sistema unidimensional el DMRG funcionaba mejor. Sin embargo, en los trabajos recientes [\[28–30\]](#) se presentan evidencias numéricas de que el DMRG funciona mejor en geometría de estrella, esto es, usando directamente la [\(Ecuación 3.2\)](#) que corresponde a la [Figura 3.3](#) (a).

En este trabajo de tesis logramos una mejora sustancial al DMFT al implementar la dinámica del vector corrección junto con la geometría de estrella. Los orbitales son ordenados por energía de sitio y separamos en espín. Esto nos permitió usar un número razonablemente grande de sitios de baño para representar la hibridización; por ejemplo, 60 sitios para el c2-DMFT y 36 sitios para el c4-DMFT comparados con 12 sitios en [\[65\]](#).

A continuación aportamos algunas ideas desarrolladas en esta tesis hacia el entendimiento de esta disminución en el grado de entrelazamiento en la geometría de estrella respecto a la de cadena.

La matriz densidad reducida de un sitio DMRG es una matriz de números reales de 2×2 :

$$\rho^1 = \begin{pmatrix} a & b \\ b & 1 - a \end{pmatrix}.$$

En la base de Fock $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ a es el peso de $|0\rangle\langle 0|$, o sea, $a = 1 - n$ con n la ocupación. La parte no diagonal b , como vimos en la [Sección 2.7](#), es cero en el bloque si el estado

global tiene número de partículas definido, de donde:

$$\rho^1 = \begin{pmatrix} 1-n & 0 \\ 0 & n \end{pmatrix}.$$

La entropía del sitio viene dada por $S_{vN}^1 = -n \log_2 n - (n-1) \log_2(n-1)$ y tiene su máximo en $n = 1/2$ y su mínimo en $n = 0$ ó 1 . Esto nos dice que los sitios que están completamente llenos o vacíos no tienen entrelazamiento con el resto. Para la geometría de cadena, ver [Figura 3.3](#), los sitios de baño tienen energías similares (todas cero si hay simetría electrón-hueco) y llenados cercanos a $n = 1/2$, así que la entropía de sitio es alta. Para la geometría de estrella hay sitios con energía muy baja o muy alta, que estarían casi llenos o casi vacíos y que por tanto no participan casi en el entrelazamiento entre los bloques. Con esto se justifica parcialmente lo observado en la práctica.

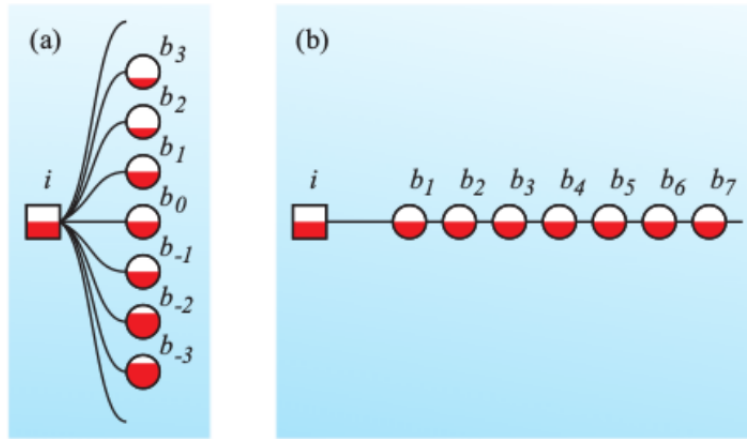


Figura 3.3: Esquemas de las ocupaciones para la misma impureza, representando el baño en forma de estrella (izquierda) y de cadena (derecha) (tomado de [2]).

3.4. Ejemplo: modelo de Hubbard en la red de Bethe

Consideremos el modelo de Hubbard de una banda en la red de Bethe (ver [Sección A.1](#)):

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i,$$

y su solución paramagnética. Como ya remarcamos en la sección anterior, para aplicar el algoritmo DMFT en nuestro esquema, sólo debemos definir tres parámetros: \hat{V}_i , G_0 , T . En este caso son:

$$\hat{V}_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

Algoritmo 3.1 Prototipo de un programa DMFT usando nuestra clase `dmftBase`. `nPoles` es la cantidad a usar de sitios de baño por impureza para generar el hamiltoniano H_{imp} que después se entrega al DMRG.

```
#include "dmftbase.h"

struct dmftBethe:public dmftBase
{
    double t, U, mu;

    dmft2orbBethe(int nPoles, double t,double U,double mu); //inicializacion

    matrizR LocalHamiltonian() const; //corresponde a T
    matriz LatticeGreen(const matriz& z) const; //corresponde a G0
    void BuildInteractHamiltonian(); //corresponde a Vi
};
```

$$T = -\mu,$$

$$G_0(\omega) = 2 \left[\omega + \sqrt{\omega^2 - 4t^2} \right]^{-1}. \quad (3.10)$$

Mostramos resultados para este modelo en el Capítulo 5, [Figura 5.8](#). Este modelo constituye uno de los ejemplos más sencillos de aplicación exitosa del DMFT. Donde se observa claramente la transición metal-aislante al aumentar U . En [\[21\]](#) se trató por primera vez este problema usando DMRG como simulador de impureza.

3.5. Códigos implementados en esta tesis

En la misma línea expuesta en la [Sección 2.8](#), implementamos el algoritmo DMFT general presentado en este capítulo, en un software de código abierto (<https://sourceforge.net/projects/dmft-dmrg>). Definimos una clase abstracta `dmftBase` con todas las herramientas necesarias, de forma que para resolver un problema DMFT sólo hay que heredar de ella y definir los mencionados 3 parámetros del algoritmo: \hat{V}_i , G_0 , T . En principio no hay restricción sobre el problema a estudiar o los parámetros más que los explicado en la [Sección 3.2](#). En el siguiente cuadro ofrecemos el prototipo para resolver el ejemplo de la sección anterior.

El programa `dmftBase` hace una iteración DMFT: lee las funciones de Green calculadas (si hay) y genera la autoenergía, la hibridización y el nuevo baño para el DMRG. Típicamente se requiere iterar menos de 20 veces para lograr convergencia, excepto cuando se está cerca de la transición metal-aislante.

Capítulo 4

Modelos correlacionados de una banda

4.1. Introducción

El modelo de Hubbard de una banda reproduce mucha de la física de los materiales correlacionados y se ha usado en la modelación de materiales de interés. Por ejemplo, se argumenta que la física esencial de los superconductores de alta temperatura basados en cupratos se puede capturar por un modelo de Hubbard de una banda [34, 35].

En este capítulo consideramos el modelo de Hubbard en la red cuadrada como en [62, 66], donde se intenta modelar el estado superconductor y de pseudogap de los superconductores de alta temperatura de la familia de los cupratos. Presentamos las aplicaciones de los métodos expuestos en los capítulos 2 y 3 a este modelo. Incluimos el estudio de las correlaciones espaciales, al considerar la extensión de cluster del DMFT con 2 y 4 sitios locales. Mostramos los resultados de la densidad de estados (DOS) obtenidos.

Nuestro estudio de este modelo dio lugar a las publicaciones [30, 67]

4.2. Modelo de Hubbard en la red cuadrada

Consideramos el siguiente modelo en la red cuadrada:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i, \quad (4.1)$$

$\langle\langle ij \rangle\rangle$ representa a los segundos vecinos (vecinos en la diagonal).

4.2.1. Caso no interactuante

El hamiltoniano no interactuante $U = 0$ se resuelve pasando a la base de Bloch $d_{k\sigma}^\dagger$ (transformada de Fourier). Cada sitio de la red j está determinado por dos coordenadas

$\mathbf{r}_j = (x_j, y_j)$. Hacemos el cambio de base

$$c_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger,$$

donde L_x^2 es el tamaño de la red (después $L_x \rightarrow \infty$), $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ un vector de la red recíproca: $k_x = \frac{2\pi}{L_x} \kappa_x$, $k_y = \frac{2\pi}{L_x} \kappa_y$, $\kappa_{x,y} = 0, 1, \dots, L_x - 1$. Debido a la relación de completitud $\sum_j \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})) = L_x^2 \delta_{j,j'}$, el Hamiltoniano queda diagonal:

$$H^0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\epsilon(\mathbf{k}) - \mu] d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.2)$$

con

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t (\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y \quad (4.3)$$

la relación de dispersión. Tomamos $t = 0,25$ (semiancho de banda 1) como la unidad de energía. La función de Green no interactuante es:

$$G_0(\omega + \mu) = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega + \mu - \epsilon(\mathbf{k})]^{-1}. \quad (4.4)$$

4.2.2. Resultados DMFT

Los tres parámetros para el DMFT de un sitio son:

$$\hat{V}_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

$$T = -\mu,$$

$$G_0(\omega) = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega - \epsilon(\mathbf{k})]^{-1}.$$

Primeramente mostramos la transición metal-aislante de Mott en la parte izquierda de la [Figura 4.1](#). Observamos que esta ocurre entre $U = 3$ y $U = 4$. En la parte derecha de la figura se aprecia que el carácter metálico de la banda se refuerza ante el dopaje, para un valor fijo de U ; además se muestra una transferencia de pesos entre las bandas de Hubbard debido a las correlaciones. En este caso se puede apreciar el carácter metálico por la variación del llenado con el potencial químico μ .

La [Figura 4.2](#) muestra los resultados para un valor mayor de U , en el cual el carácter aislante primeramente se mantiene al aumentar el μ . Sin embargo, para valores suficientemente grandes de μ , el sistema se vuelve metálico y adquiere una alta densidad de estados en el nivel de Fermi. Nótese que mientras el sistema es aislante, el cambio de potencial químico no afecta el llenado y sólo resulta en un movimiento rígido de la densidad de estados. El pequeño valor de la DOS en el régimen aislante es debido al

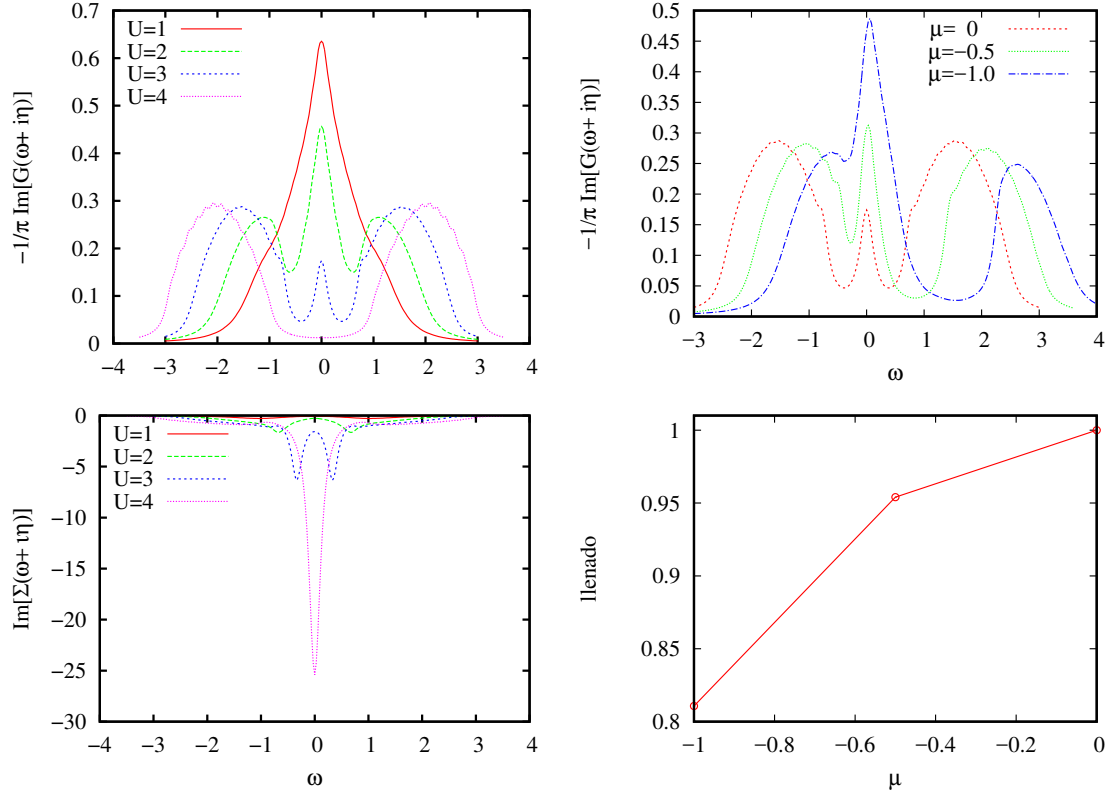


Figura 4.1: A la izquierda: sistema semilleno para $U = 1; 2; 3; 4$. A la derecha: $U = 3$ y cambiamos el potencial químico $\mu = 0; -0.5; -1$. En la parte superior se muestra la DOS y en la parte inferior, la parte imaginaria de la autoenergía y el llenado en función de μ , respectivamente. Este último gráfico muestra el carácter metálico. Usamos un baño de 30 sitios y $\eta = 0.12$. La energía de Fermi se ubica en $\omega = 0$.

ensanchamiento lorentziano, ver (Ecuación 2.23).

4.3. Inclusión de correlaciones espaciales

Consideramos el mismo problema físico de la sección anterior, pero interpretado como una super-red con celda unidad de dos sitios vecinos ($N_x = 2$, $N_y = 1$, $N_c = 2$). Denominamos al respectivo tratamiento celular-DMFT, c2-DMFT. Lo mismo hacemos tomando una celda unidad de $2 \times 2 = 4$ sitios ($N_x = 2$, $N_y = 2$, $N_c = 4$), correspondiendo al c4-DMFT.

4.3.1. Caso no interactuante

La función de Green que se obtuvo en (Ecuación 4.4) sigue siendo válida, por supuesto; sin embargo ahora necesitamos la función de Green matricial para N_c sitios. La idea es usar la dispersión $\epsilon(\mathbf{k})$ de la sección anterior. Para la super-red (de 2 ó 4 sitios por celda), la relación de dispersión matricial $\tilde{\epsilon}(\tilde{\mathbf{k}})$ se obtiene simplemente integrando

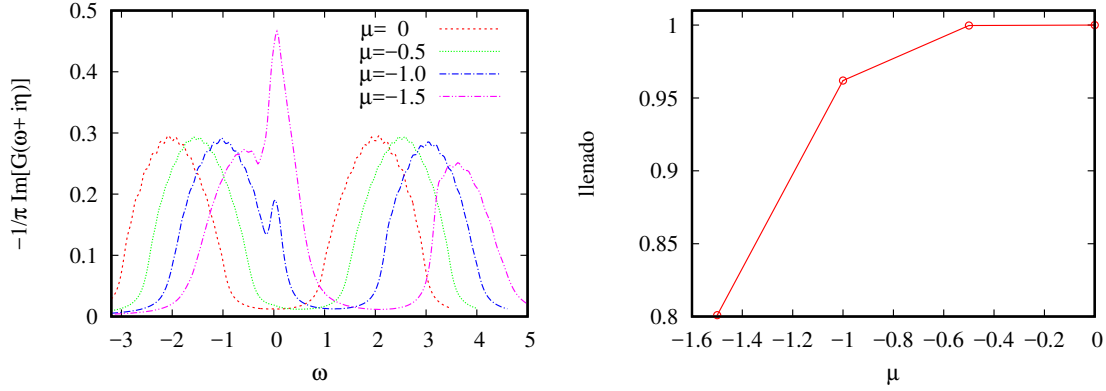


Figura 4.2: Arriba: DOS para $U = 4$, los mismo parámetros que en [Figura 4.1](#), y varios potenciales químicos. Abajo: llenado vs μ mostrando la transición de metal a aislante.

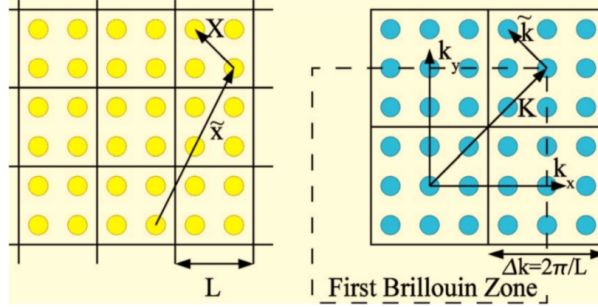


Figura 4.3: Esquema de la super-red en el espacio directo y recíproco. Aquí L corresponde a nuestro L_x , tomado de [\[3\]](#).

por los grados de libertad intra-celda:

$$\tilde{\epsilon}(\tilde{\mathbf{k}})_{IJ} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} \exp \left[i(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{R}_{IJ} \right] \epsilon(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}), \quad (4.5)$$

donde $\tilde{\mathbf{k}}$ es el vector recíproco para la super-red, y \mathbf{K} el vector recíproco intracelda, [Figura 4.3](#). Esto es así porque $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$ y lo que se está haciendo es una transformada parcial de Fourier, ver ecuación (23) de [\[3\]](#). Calculamos explícitamente la suma ([Ecuación 4.5](#)) teniendo en cuenta que $\epsilon(\mathbf{k})$ en ([Ecuación 4.3](#)) se escribe como la suma de tres productos separados en k_x y k_y .

Para el c2 tenemos:

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = -2t \cos k_y \mathbf{1}_{2 \times 2} - t D(k_x) - t' D(k_x) \cos k_y,$$

y para el c4:

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = -t D(k_x) \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2} - t \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes D(k_y) - t' D(k_x) \otimes D(k_y).$$

donde

$$D(k) = \begin{pmatrix} 0 & 1 + \exp(2ik) \\ 1 + \exp(-2ik) & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1}_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Con esto, ya tenemos la forma explícita de la función de Green no interactuante:

$$G_0(\omega \mathbf{1} - T) = \frac{N_c}{L_x^2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left[\omega \mathbf{1} - T - \tilde{\epsilon}(\tilde{\mathbf{k}}) \right]^{-1},$$

con $k_{x,y} = \frac{2\pi N_{x,y}}{L_x} \kappa_{x,y}$, $\kappa_{x,y} = 0, 1, \dots, L_x/N_{x,y} - 1$.

4.3.2. Resultados

Nuestros tres parámetros \hat{V}_i , T , G_0 son:

$$\hat{V}_i = U \sum_{I=1}^{N_c} n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow},$$

$$T = \begin{cases} \begin{pmatrix} -\mu & t \\ t & -\mu \end{pmatrix} & \text{c2-DMFT} \\ \begin{pmatrix} -\mu & t & t & t' \\ t & -\mu & t' & t \\ t & t' & -\mu & t \\ t' & t & t & -\mu \end{pmatrix} & \text{c4-DMFT} \end{cases},$$

$$G_0(\omega) = \frac{N_c}{L_x^2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left[\omega \mathbf{1} - \tilde{\epsilon}(\tilde{\mathbf{k}}) \right]^{-1}.$$

Finalmente, señalamos que la matriz de hibridización Γ tiene la siguiente forma general, [68]:

$$\Gamma(\omega) = \begin{cases} \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} & \text{c2-DMFT} \\ \begin{pmatrix} a & b & b & c \\ b & a & c & b \\ b & c & a & b \\ c & b & b & a \end{pmatrix} & \text{c4-DMFT} \end{cases}$$

y puede ser diagonalizada usando la correspondiente transformación unitaria R ; se obtienen 2 (para c2) ó 3 (para c4) ajustes independientes.

En la [Figura 4.4](#) mostramos la densidad de estados para el caso semilleno, $t = 0,25$

y sin hopping a segundos vecinos. En esta situación tenemos simetría electrón-hueco lo cual explica la paridad en ω de la DOS. Se observa que la transición a aislante ocurre primero para cluster, este es un hecho conocido [69] y de cierta forma evidencia que el tratamiento DMFT de un sitio no es suficiente y que las correlaciones espaciales son de importancia.

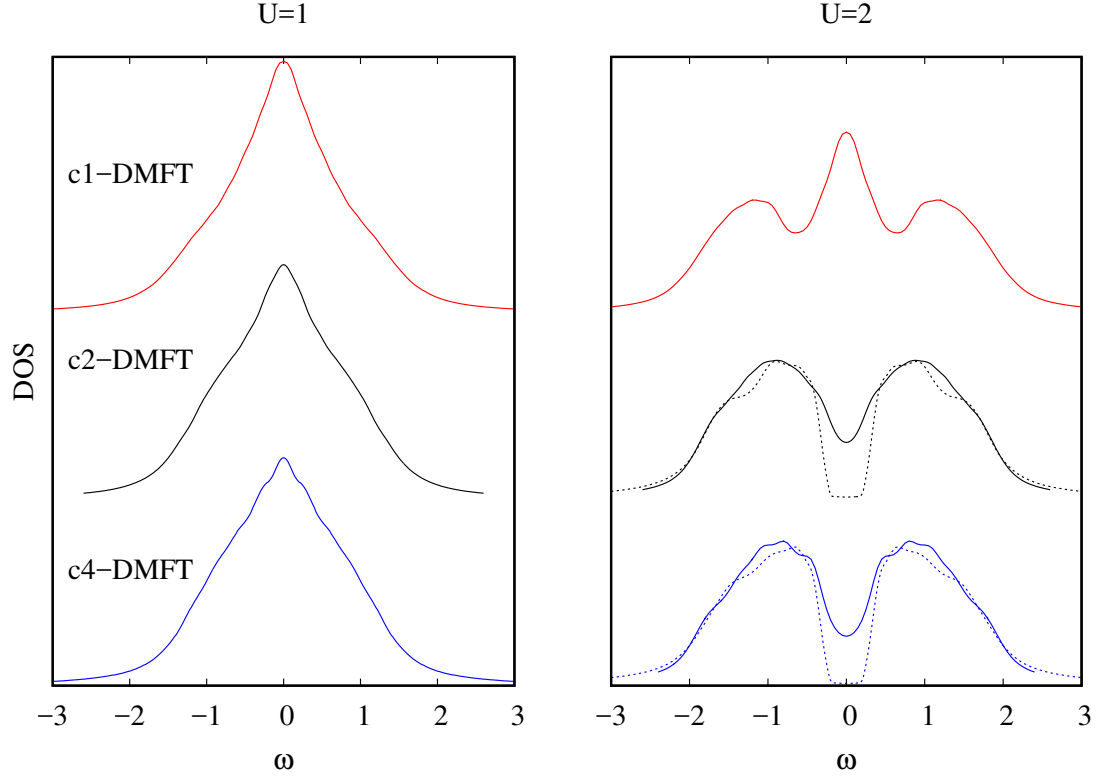


Figura 4.4: Comparación de la DOS calculada usando distintos tamaños de cluster para el hamiltoniano de Hubbard en la red cuadrada y dos valores de U . Se muestran los resultados usando dos valores diferentes del ensanchamiento η para enfatizar el gap del régimen aislante. Las curvas están desplazadas por claridad. Usamos hasta 60 sitios para la impureza en el c2-DMFT y 36 para el c4-DMFT.

En las siguientes figuras mostramos resultados del sistema dopado y con hopping a segundos vecinos $t' = -0,05$. También pueden verse las funciones de Green no locales G_{01} y G_{03} a primeros y segundos vecinos, respectivamente. Al tratar con cluster más grandes, se observa la aparición de estructuras interesantes en la DOS como gap e indicios pseudogap en $\omega = 0$, también reportadas anteriormente [69].

La técnica presentada aquí mejora el alcance y potencialidad del DMFT, por ejemplo, al considerar sistemas más grandes (nosotros usamos hasta 32 sitios de baño comparado con 8 en [65]).

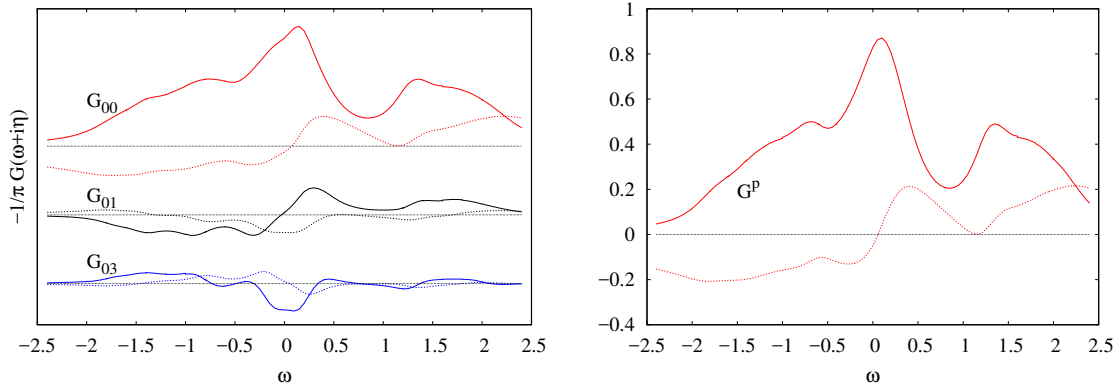


Figura 4.5: Parte imaginaria (línea continua) y real (línea de puntos) de la función de Green para el modelo de Hubbard dopado ($\mu = -0,3$) en la red cuadrada con $t' = -0,05$ y $U = 2$, calculados usando c4-DMFT. A la derecha: función de Green obtenida después de la periodización (Subsección 3.2.1). La energía de Fermi está en $\omega = 0$ y las líneas horizontales están en 0.

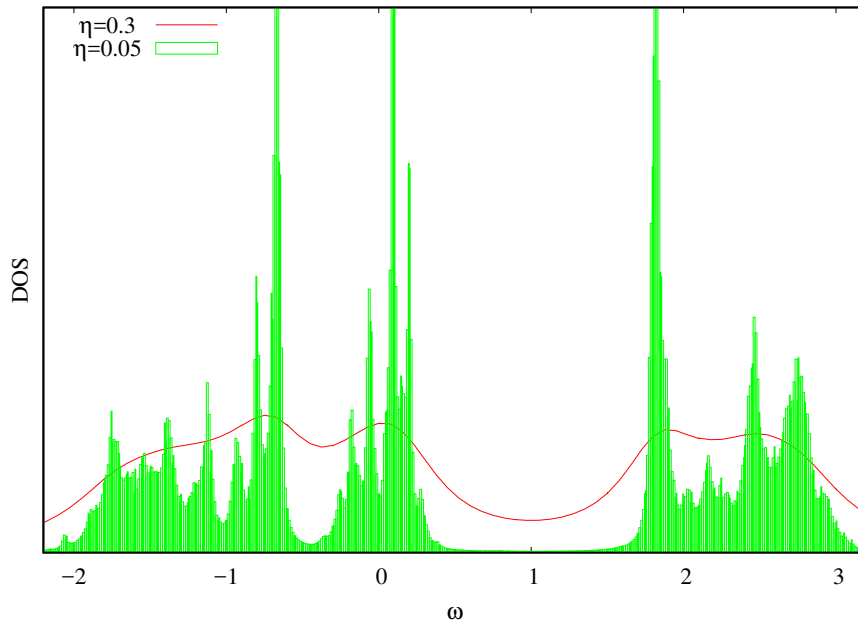


Figura 4.6: DOS para el sistema dopado ($\mu = -0,6$ y llenado $\langle n \rangle \approx 0,927$) con hopping a segundos vecinos $t_p = -0,05$, $U = 3$. Se observa la formación de gap en $\omega \in [0,5, 1,5]$ e indicios de pseudogap en $\omega = 0$. Este es un modelo mínimo de los materiales superconductores basados en cupratos en estado normal.

Capítulo 5

Modelos correlacionados de dos bandas

5.1. Introducción

En este capítulo extendemos nuestro estudio a los modelos de dos bandas, o sea, dos orbitales por sitio de red. Las bandas pueden hibridizarse entre sí por el movimiento de un electrón entre orbitales distintos de un mismo sitio o de sitios vecinos¹. Este caso lo estudiamos en la [Sección 5.2](#) para la red cuadrada donde veremos sus consecuencias.

Por otro lado, como discutimos en la Introducción General, puede ser importante la interacción de Coulomb entre electrones de bandas diferentes, dando lugar, en su variante local, a extensiones del modelo de Hubbard. Primeramente consideramos el modelo de Hubbard-Hund como ejemplo más simple de modelo multiorbital interactuante en la [Sección 5.3](#). Seguidamente estudiamos el modelo de Hubbard-Kanamori en la red de Bethe en la [Sección 5.4](#), e incluimos además la posibilidad de hopping interorbital.

Como se verá aparecen varios fenómenos de por sí interesantes como la transición metal-aislante para una banda antes que para la otra al aumentar U , lo cual se conoce como transición de Mott selectiva.

Estudiando estos modelos de dos bandas, encontramos unas excitaciones novedosas, que aparecen como picos en la DOS, en energías del orden de $\Delta = U - U_{12}$ para la fase metálica, hasta ahora no reportados en la literatura. En la [Sección 5.5](#) presentamos el estudio de las cuasipartículas (QP) asociadas a estas excitaciones, que corresponde con la publicación [\[70\]](#).

¹En general se pueden escoger orbitales ortogonales en el sitio o matrices de hopping a primeros vecinos en forma diagonal, pero no ambas cosas a la vez.

5.2. Modelo de Hubbard hibridizado

Con la motivación de estudiar la existencia de transición selectiva para anchos de banda iguales, tratamos el problema de dos orbitales por sitio tipo $d_{x^2-y^2}$ y d_{z^2} en la red cuadrada, con interacción de Coulomb U intra-orbital y desdoblamiento por campo cristalino Δ_c . Incluimos un hopping interorbital a primeros vecinos, no obstante, debido a la simetría de la red, la función de Green local es diagonal en los orbitales, y los baños DMFT correspondientes a cada banda están desacoplados. Con esto, cabe preguntarnos si un orbital podría tener transición de Mott antes que otro, o sea, transición selectiva.

El modelo que estamos considerando es

$$H = \sum_{iIJ\sigma} t_{IJ} c_{iI\sigma}^\dagger c_{iJ\sigma} + \sum_{\langle ij \rangle IJ\sigma} t_{IJ}^{ij} c_{iI\sigma}^\dagger c_{jJ\sigma} + U \sum_i n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow}, \quad (5.1)$$

donde i, j son los sitios de la red cuadrada, $\langle ij \rangle$ primeros vecinos, $I, J = 1, 2$ son índices de orbitales, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ el espín. H contiene sólo hoppings a primeros vecinos, esto es:

$$T = (t_{IJ}) = \begin{pmatrix} \Delta_c - \mu & 0 \\ 0 & -\Delta_c - \mu \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$t^{ij} = (t_{IJ}^{ij}) = \begin{cases} T^x = \begin{pmatrix} t & t' \\ t' & t \end{pmatrix} & \text{si } |i_x - j_x| = 1 \\ T^y = \begin{pmatrix} t & -t' \\ -t' & t \end{pmatrix} & \text{si } |i_y - j_y| = 1. \end{cases}$$

Notar que los coeficientes interorbitales t' tienen signos diferentes, dependiendo de la dirección espacial (x ó y) en la que nos "movamos", correspondiendo con dos orbitales tipo $d_{x^2-y^2}$ y d_{z^2} como veremos más abajo. Este estudio dio lugar a la publicación [71].

Por último, recordemos que la función de Green local viene dada por $G_{JI\sigma}(\omega) = G_{JI\sigma}^>(\omega) + G_{JI\sigma}^<(-\omega)$, donde:

$$G_{JI\sigma}^>(\omega) = \langle E_0 | c_{0J\sigma} \frac{1}{\omega + i\eta - H + E_0} c_{0I\sigma}^\dagger | E_0 \rangle,$$

$$G_{JI\sigma}^<(\omega) = \langle E_0 | c_{0I\sigma}^\dagger \frac{1}{\omega + i\eta - H + E_0} c_{0J\sigma} | E_0 \rangle,$$

y $|E_0\rangle$ es el estado fundamental.

5.2.1. Simetrías

La reflexión diagonal σ_d de la red cuadrada (respecto a la recta $y = x$) nos transforma el orbital $d_{x^2-y^2} \rightarrow -d_{x^2-y^2}$ y el d_{z^2} queda invariante. Por un lado, este es el

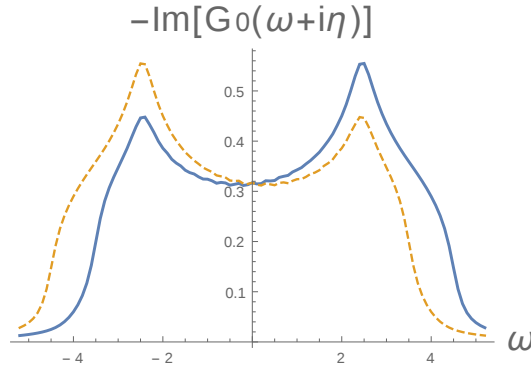


Figura 5.1: Funciones de Green no interactuantes $(G_0)_{11}$ (línea continua) y $(G_0)_{22}$ (línea discontinua) para $t = 1$, $t' = 0,6$, $\Delta = 0,5$, $\eta = 0,2$.

origen de la diferencia de signo entre T^x y T^y , y por otro, la simetría nos lleva a $G_{12} = -G_{12} \implies G_{12} = 0$. La función de Green matricial tiene la forma general:

$$G(\omega) = \begin{pmatrix} G_{11}(\omega) & 0 \\ 0 & G_{22}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

y la hibridización Γ tiene la misma estructura (Ecuación 5.3). Esto significa que desde el punto de vista local (entiéndase, un cálculo DMFT) los dos orbitales están desacoplados, teniendo cada uno de ellos una hibridización independiente que proviene de la red.

En el caso semilleno $\mu = 0$, tenemos una simetría parecida a electrón-hueco. Se puede verificar que la transformación $c_{iI\sigma}^\dagger \rightarrow (-1)^{i_x+i_y+I} c_{i\bar{I}\sigma}$ mantiene invariante el hamiltoniano (Ecuación 5.1). Esto significa que $G_{11}(\omega) = G_{22}(-\omega)$ y tenemos consecuencias similares a las discutidas para la simetría electrón-hueco (Sección 3.2).

Consideraremos la solución paramagnética.

5.2.2. Caso no interactuante

Cambiando a la base de Bloch “ \mathbf{k} ”, la parte no interactuante queda:

$$H^0 = \sum_{\mathbf{k}, IJ\sigma} t_{IJ} d_{\mathbf{k}I\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}J\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, IJ\sigma} \epsilon_{IJ}(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}I\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}J\sigma} \quad (5.4)$$

con $\epsilon(\mathbf{k}) = 2T^x \cos k_x + 2T^y \cos k_y$, donde $k_{x,y} = \frac{2\pi}{L_x} \kappa_{x,y}$, $\kappa_{x,y} = 0, 1, \dots, L_x - 1$; y L_x^2 es el tamaño de la red (después $L_x \rightarrow \infty$). Por tanto, la función de Green matricial (2×2) queda:

$$G_0(\omega \mathbf{1} - T) = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega \mathbf{1} - T - \epsilon(\mathbf{k})]^{-1}. \quad (5.5)$$

En la Figura 5.1 mostramos un ejemplo.

5.2.3. Resultados

Nuestros tres parámetros para el DMFT en este caso son:

$$\hat{V}_i = U \sum_{I=1}^2 n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow},$$

$$T = \begin{pmatrix} \Delta_c - \mu & 0 \\ 0 & -\Delta_c - \mu \end{pmatrix},$$

$$G_0(\omega) = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega \mathbf{1} - \epsilon(\mathbf{k})]^{-1}.$$

A continuación aparecen los principales resultados para varios parámetros representativos.

En la [Figura 5.2](#) mostramos la DOS de ambos orbitales para diferentes valores de la interacción U , manteniendo el campo cristalino Δ_c fijo. También se muestra el llenado de cada orbital en función de U . Encontramos que, debido al hopping interorbital t' , el orbital menos energético (orbital 2) desarrolla un peso grande en la energía de Fermi. Ambos orbitales transicionan al estado aislante al incrementar U , como se ve también en los valores de llenado, que se acercan a la situación semilleno ($n_{iI} = 1$) simultáneamente.

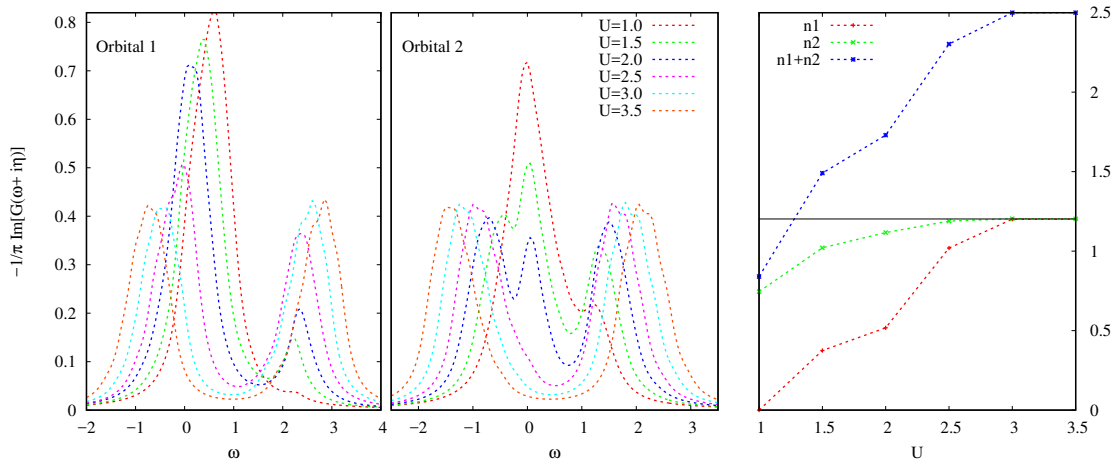


Figura 5.2: Transición de Mott para el sistema dopado, $\mu = -0.7$. La transición parece ocurrir simultáneamente en ambos orbitales. Campo cristalino $\Delta = 0.3$, $t' = 0.15$ y $\mu = -0.7$. A la derecha: llenado de orbitales vs U .

Para interacciones pequeñas, se encuentra una transición de metal a aislante de banda, al aumentar Δ_c , [Figura 5.3](#).

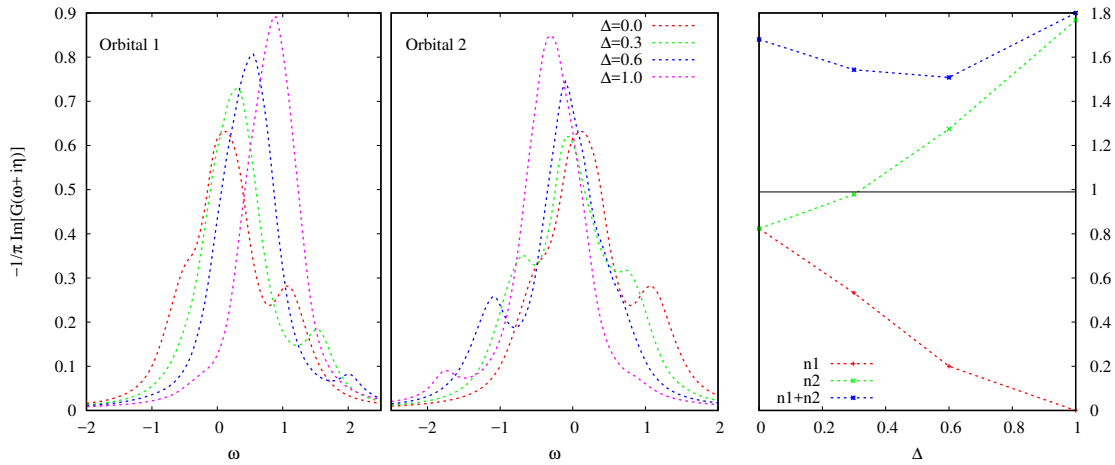


Figura 5.3: Efecto del campo cristalino Δ para el metal dopado $\mu = -0,3$. DOS para $U = 1$, $t' = 0,15$ y $\mu = -0,3$, cambiando Δ se ve una transferencia de carga de la banda 1 a la 2. A la derecha: los llenados correspondientes.

En la [Figura 5.4](#) variamos el potencial químico y se observa que, para estos parámetros, el orbital 2 permanece semilleno mientras la banda 1 se vacía. Una DOS finita en el nivel de Fermi en el orbital 1 trae consigo una DOS finita también en el orbital 2 (vista como un pequeño pico a energía cero).

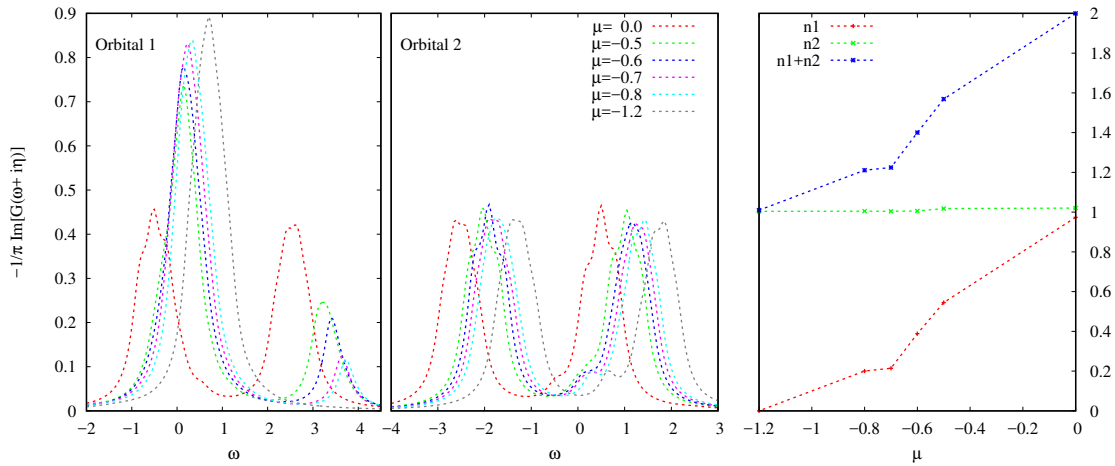


Figura 5.4: El sistema se dopa sucesivamente pero la ocupación sólo cambia en el orbital 1, mientras el orbital 2 mantiene $n_2 = 1$. Se mantiene el carácter metálico al haber densidad de estados en 1. Igual que en la [Figura 5.3](#) pero para $U = 3$, $\Delta = 1$.

Es interesante analizar el efecto de una DOS alta en el orbital 1 sobre el orbital 2. Encontramos que, cuando el nivel de Fermi queda en la banda inferior de Hubbard para el orbital 1, esto causa una DOS finita en el orbital 2 en $\omega = 0$, incluso para valores grandes de U , ver [Figura 5.5](#). Este pico es robusto para diferentes longitudes de baño (para representar la hibridización) y diferentes η . Como consecuencia, el orbital 2 no tiene una transición de Mott ni tampoco transición selectiva.

Medimos la integral del pico en $\omega = 0$ para el orbital 2 (que sería proporcional al peso de cuasipartícula Z_2). Encontramos que, mientras la energía de Fermi esté dentro

de la banda de Hubbard del orbital 1, el peso de cuasipartícula en el orbital 2 no va a cero. Fijando los demás parámetros, Z_2 decrece exponencialmente con U como en el problema de Kondo (ver Figura 5.5), y por tanto no muestra una transición metal-aislante para ningún valor de U . Como se ve en la figura, cuanto más grande sea el hopping interorbital, más DOS encontramos en el orbital 2 en $\omega = 0$.

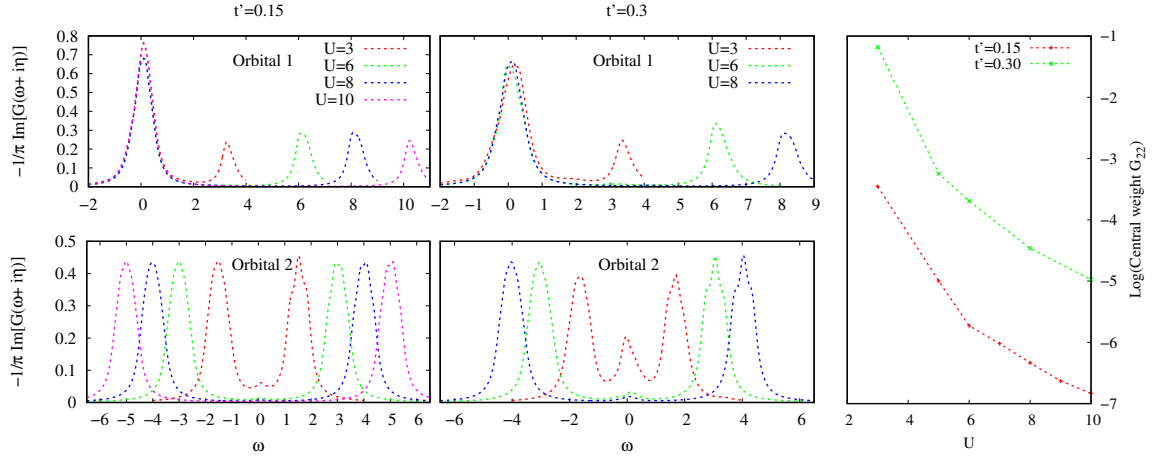


Figura 5.5: A la izquierda y centro: DOS de cada orbital en función de U para $t' = 0,15$ y $t' = 0,3$, respectivamente. A la derecha: el correspondiente peso del pico central en la banda 2 como función de U en escala semi-logarítmica. Fijamos $\Delta = 0,75$, $\mu = -0,75$.

Por último, en la Figura 5.6 tenemos el caso cuando las dos bandas corresponden a metales correlacionados, la 1 más dopada que la 2 (con lo cual debería transicionar primero la 2). Aumentamos el U y se ve que la transición ocurre simultáneamente; debido al hopping interorbital.

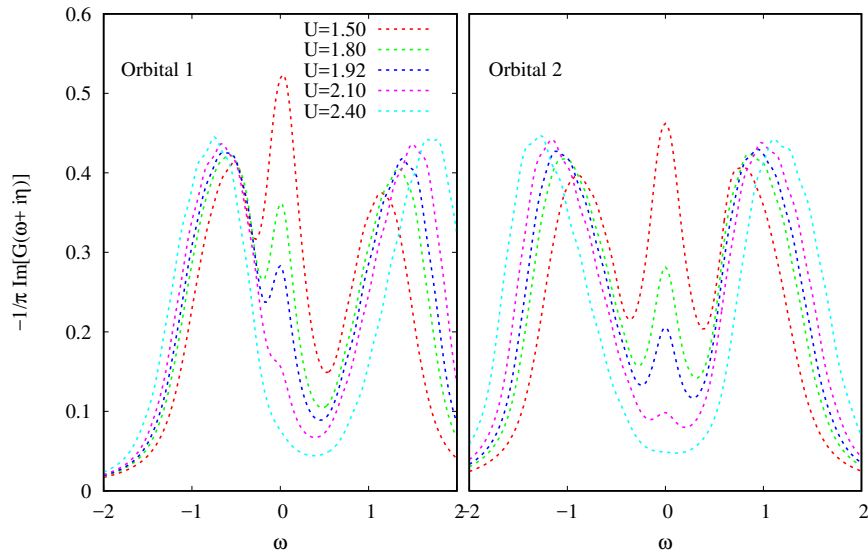


Figura 5.6: Situamos el potencial químico entre las dos bandas de Hubbard para cada orbital, diferenciando sin embargo la posición relativa de estas. La transición de Mott se observa simultáneamente en ambos. No encontramos evidencia de transición selectiva para estos parámetros.

Conclusiones sobre este modelo Encontramos que la hibridación interorbital provoca que, mientras una banda sea metálica, vamos a encontrar una DOS finita en el nivel de Fermi de la otra, incluso para U grande. La transición metal-aislante, si hay, ocurre simultáneamente para ambos orbitales. Cuando los parámetros de campo cristalino y potencial químico hacen que el nivel de Fermi de un orbital esté en una de sus bandas de Hubbard, entonces en el otro orbital aparece un pico de cuasipartícula en $\omega = 0$ que decae exponencialmente con la interacción U .

5.3. Modelo de Hubbard-Hund

Para la red cuadrada consideramos un modelo de dos bandas sin hopping interorbital, pero incluyendo el acoplamiento de Hund J en forma invariante rotacional:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle I \sigma} c_{iI\sigma}^\dagger c_{jI\sigma} + \sum_i \hat{V}_i - \mu' \sum_i n_i,$$

$$\hat{V}_i = \frac{U}{2} n_i^2 - \frac{J}{2} s_i^2,$$

donde n_i y s_i son los operadores de carga y espín total en el sitio, respectivamente; y $\mu' = 2U$ para tener el sistema semilleno. Expandiendo los operadores de sitio se puede escribir:

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle ij \rangle I \sigma} c_{iI\sigma}^\dagger c_{jI\sigma} + \left(U + \frac{3}{4}J \right) \sum_{iI} n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow} + U \sum_{i\sigma\sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} \\ & - J \sum_i \mathbf{S}_{i1} \cdot \mathbf{S}_{i2} - \mu \sum_i n_i, \end{aligned}$$

donde $\mu = \frac{3}{2}U + \frac{3}{8}J$ y \mathbf{S}_{iI} es el operador de espín en el orbital I sitio i . Nuestro estudio de este modelo dio lugar a las publicaciones [4, 72].

Con vistas al tratamiento DMFT, la función de Green no interactuante $U = J = 0$ es como en la sección anterior con $t' = \Delta = 0$ y con esto los tres parámetros son:

$$\hat{V}_i = \left(U + \frac{3}{4}J \right) \sum_{I=1}^2 n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow} + U \sum_{\sigma\sigma'} n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} - J \mathbf{S}_{i1} \cdot \mathbf{S}_{i2},$$

$$T = \begin{pmatrix} -\mu & 0 \\ 0 & -\mu \end{pmatrix},$$

$$G_0(\omega) = \frac{1}{L_x^2} \sum_{\mathbf{k}} [\omega \mathbf{1} - \epsilon(\mathbf{k})]^{-1},$$

con $\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$, donde $k_{x,y} = \frac{2\pi}{L_x} \kappa_{x,y}$, $\kappa_{x,y} = 0, 1, \dots, L_x - 1$; y L_x^2 es el

tamaño de la red (después $L_x \rightarrow \infty$). Tomamos el semiancho de banda $D = 4t$ como la unidad de energía.

5.3.1. Resultados

Para los cálculos usamos una impureza efectiva de $L = 42$ sitios al representar la hibridización y $m = 256$ estados en el DMRG. Hicimos una caracterización del modelo en los parámetros U y J . Primeramente se reproduce la conocida transición de Mott al aumentar U para un $J = 0,1$ fijo, ver [Figura 5.7](#). Por otra parte, fijando $U = 2$, también se puede observar una fase metálica para $J = 0,1$ y una fase aislante para J mayores, o sea, que se produce una transición (de Hund) aumentando el valor absoluto de J .

Quisimos comparar nuestros resultados con otros cálculos (obtenidos por Jorge Facio en su doctorado) usando bosones esclavos invariantes ante rotación [\[4, 5\]](#), ver panel inferior de la figura. Para esto calculamos el peso de cuasipartícula $Z^{-1} = 1 - d\text{Re}[\Sigma(\omega)]/d\omega|_{\omega=0}$ en función de U para varios valores de J . Es bien conocido que los métodos de bosones esclavos tienden a sobrestimar la metalicidad del sistema. Esto se manifiesta en el valor alto de Z para un U dado y en el valor de la interacción crítica U_c a la cual ocurre la transición metal-aislante. Si se usa el valor renormalizado U/U_c , la figura muestra una buena coincidencia entre los métodos. Llama la atención que, para $J \neq 0$, hay un salto de Z de valores finitos a cero en la transición metal-aislante. Un análisis de la energía libre de la red, usando bosones esclavos, confirma que la transición es de primer orden para $J \neq 0$ y de segundo orden para $J = 0$ [\[5\]](#).

5.4. Modelo de Kanamori-Hubbard

Como caso más general de modelo multi-orbital consideramos

$$H = t_{12} \sum_{iI\sigma} c_{iI\sigma}^\dagger c_{i\bar{I}\sigma} + \sum_{\langle ij \rangle I\sigma} t_I c_{iI\sigma}^\dagger c_{jI\sigma} + \sum_i \hat{V}_i, \quad (5.6)$$

donde i, j son los sitios de la red de Bethe, $\langle ij \rangle$ primeros vecinos, $I = 1, 2$ índices de orbital, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ el espín. Los coeficientes t_1 y t_2 son los hopping a primeros vecinos de cada orbital, y t_{12} el hopping interorbital. Usamos $t_1 = 0,5$ como unidad de energía.

Proponemos la interacción en forma de Hubbard-Kanamori:

$$\begin{aligned} \hat{V}_i = & U \sum_I n_{iI\uparrow} n_{iI\downarrow} + \sum_{\sigma\sigma'} (U_{12} - J\delta_{\sigma\sigma'}) n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} - \\ & - J \left(c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\downarrow}^\dagger c_{j2\uparrow} + c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i1\uparrow} c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow} \right) \\ & - J \left(c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i2\uparrow} c_{i2\downarrow} + c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow}^\dagger c_{i1\uparrow} c_{i1\downarrow} \right) \end{aligned} \quad (5.7)$$

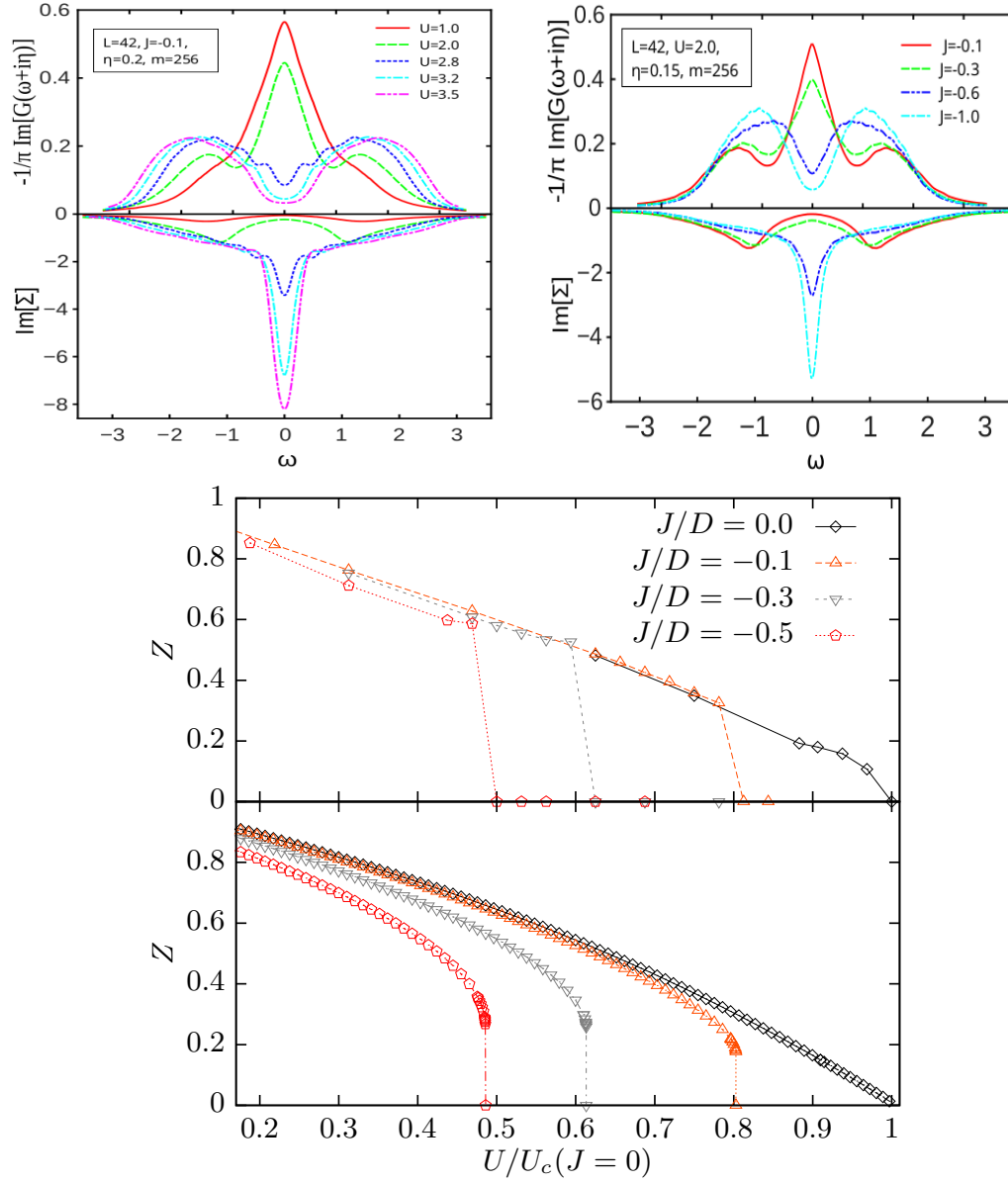


Figura 5.7: En la parte superior: DOS y parte imaginaria de la autoenergía Σ . Se ve la transición metal-aislante de Mott al aumentar U (izquierda) y de Hund al aumentar J (derecha). Parte inferior: peso de cuasipartícula en función U para varios valores de J/D . Comparación de DMFT+DMRG (gráfico de arriba, $U_c = 3,2$) con bosones esclavos (gráfico de abajo, $U_c = 4,8$, datos de Jorge Facio [4]). Los resultados sugieren una transición de primer orden para $J \neq 0$. En la figura se usó J con signo opuesto.

donde $J \geq 0$ es el intercambio de Hund, U (U_{12}) es la repulsión de Coulomb intra (inter)-orbital, con $U_{12} \leq U$.

Para el sistema no interactuante $U = U_{12} = J = 0$ podemos encontrar la función de Green generalizando el resultado (Ecuación 3.10) para matrices de 2×2 , esto es,

$$G_0(\omega) = 2 \left[\omega \mathbf{1} + \sqrt{(\omega \mathbf{1})^2 - 4B^2} \right]^{-1}, \quad (5.8)$$

donde $B = \begin{pmatrix} t_1 & 0 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix}$. Las raíces matriciales deben escogerse respetando la causalidad: el radicando se diagonaliza, de las dos raíces complejas de cada autovalor, se escoge la que tenga parte imaginaria positiva; después el resultado de la radicación se regresa a la base inicial.

Los coeficientes locales son $T = \begin{pmatrix} -\mu & t_{12} \\ t_{12} & -\mu \end{pmatrix}$, y de esta forma quedan definidos los tres parámetros \hat{V}_i , T , G_0 para nuestro cálculo DMFT.

En cuanto al paso (iv) del DMFT, Sección 3.2, que nosotros hacemos mediante ajuste, tenemos algunos casos particulares de interés:

- Si $t_{12} = 0$ entonces todas nuestras matrices de 2×2 son diagonales y sólo tenemos que calcular dos funciones de Green G_{11} y G_{22} , y hacer dos ajustes independientes, uno por cada orbital.
- Si $t_1 = t_2$ pero $t_{12} \neq 0$ entonces podemos introducir la rotación $R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ para diagonalizar la matriz de hibridización, y de nuevo hacemos sólo dos ajustes independientes.
- En el caso general, debemos hacer un ajuste de matrices no diagonales para obtener la representación del baño dada la hibridización $\Gamma(\omega)$. Esto consiste en encontrar los parámetros Υ_q y Λ_q que minimizan $\sum_{\omega} \left\| \Gamma(\omega) - \tilde{\Gamma}(\omega) \right\|^2$ usando, por ejemplo, la norma matricial $\|M\|^2 = \text{Tr} [M^T \cdot M]$.
- Con el potencial químico μ adecuado (veremos a continuación), tenemos la simetría electrón-hueco para el sistema semilleno, con las ya mencionadas ventajas.

5.4.1. Límite atómico

El caso particular en que no hay hopping entre los sitios $t_1 = t_2 = 0$ se conoce como límite atómico. Para mayor sencillez, agregamos que $t_{12} = J = 0$. Nuestro hamiltoniano es

$$h_{at} = U \sum_I n_{I\uparrow} n_{I\downarrow} + U_{12} n_1 n_2 - \mu_{at} (n_1 + n_2). \quad (5.9)$$

Tabla 5.1: Niveles atómicos de (Ecuación 5.9). Los estados representantes se eligen teniendo en cuenta la simetría de inversión de espín, ver Sección 2.5. Se escribe la configuración del orbital 1 seguida de la del orbital 2. Cada orbital puede tener 4 estados $\{0, \uparrow, \downarrow, d\}$ donde $d = \uparrow\downarrow$. Nótese que los estados de 1 y 3 partículas tienen la misma energía, lo mismo con los estados de 0 y 4 partículas debido a la simetría electrón hueco. El mínimo de energía está en semilleno, como era de esperar. La columna “energía relativa” se refiere a la energía de la configuración respecto al estado fundamental.

| Estado representante | Interacción | energía de sitio | energía | energía relativa |
|--|----------------|-------------------|-----------------|------------------|
| $ 0, 0\rangle$ | 0 | 0 | 0 | $U + U_{12}$ |
| $ \uparrow, 0\rangle, 0, \uparrow\rangle$ | 0 | $-U/2 - U_{12}$ | $-U/2 - U_{12}$ | $U/2$ |
| $ \uparrow, \uparrow\rangle, \uparrow, \downarrow\rangle$ | U_{12} | $-U - 2U_{12}$ | $-U - U_{12}$ | 0 |
| $ 0, d\rangle$ | U | $-2U_{12}$ | $-2U_{12}$ | $U - U_{12}$ |
| $ \uparrow, d\rangle, d, \uparrow\rangle$ | $U + 2U_{12}$ | $-3U/2 - 3U_{12}$ | $-U/2 - U_{12}$ | $U/2$ |
| $ d, d\rangle$ | $2U + 4U_{12}$ | $-2U - 4U_{12}$ | 0 | $U + U_{12}$ |

Para tener simetría electrón-hueco, h_{at} debe que ser invariante al cambio $n_{I\sigma} \rightarrow 1 - n_{I\sigma}$:

$$Qh_{at}Q = U \sum_I (1 - n_{I\uparrow})(1 - n_{I\downarrow}) + U_{12}(2 - n_1)(2 - n_2) - \mu_{at}(4 - n_1 - n_2).$$

Para que $Qh_{at}Q = h_{at}$ se necesita $\mu_{at} = U/2 + U_{12}$. Los niveles atómicos se muestran en la tabla.

Como veremos más adelante, el límite atómico permite ganar comprensión sobre el problema en la red. En la Tabla 5.1 se puede ver que las dos primeras excitaciones están en $U - U_{12}$ (excitación interorbital), y en $U/2$ (excitación de carga, responsable de las bandas de Hubbard).

5.4.2. Bandas idénticas

Separamos los resultados para bandas idénticas $t_1 = t_2$, $t_{12} = 0$, $J = 0$ dada su diferencia conceptual con los demás casos donde aparece una física distinta como la transición selectiva en orbital. Para los cálculos usamos una impureza efectiva de L sitios al representar la hibridización.

En esta situación la única conexión entre las bandas es U_{12} . Basándonos en los niveles atómicos, vemos que si U_{12} es pequeño comparado con $U/2$ la excitación interorbital es más costosa que la excitación de carga y es de esperar que la primera participe menos en el estado colectivo de la red. En la Figura 5.8 pusimos $U_{12} = 0,2U$ y calculamos la G y la Σ . La coincidencia con el problema de una banda es notable. Esto nos indica que la excitación interorbital está efectivamente suprimida, quedando las bandas prácticamente desacopladas.

Por el contrario, si $U_{12} > U/2$, la excitación interorbital es la dominante y el sistema se parece cada vez más al completamente simétrico $U_{12} = U$ a medida que U_{12} aumenta. En la Figura 5.9 mostramos la transición metal aislante para varias relaciones U_{12}/U .

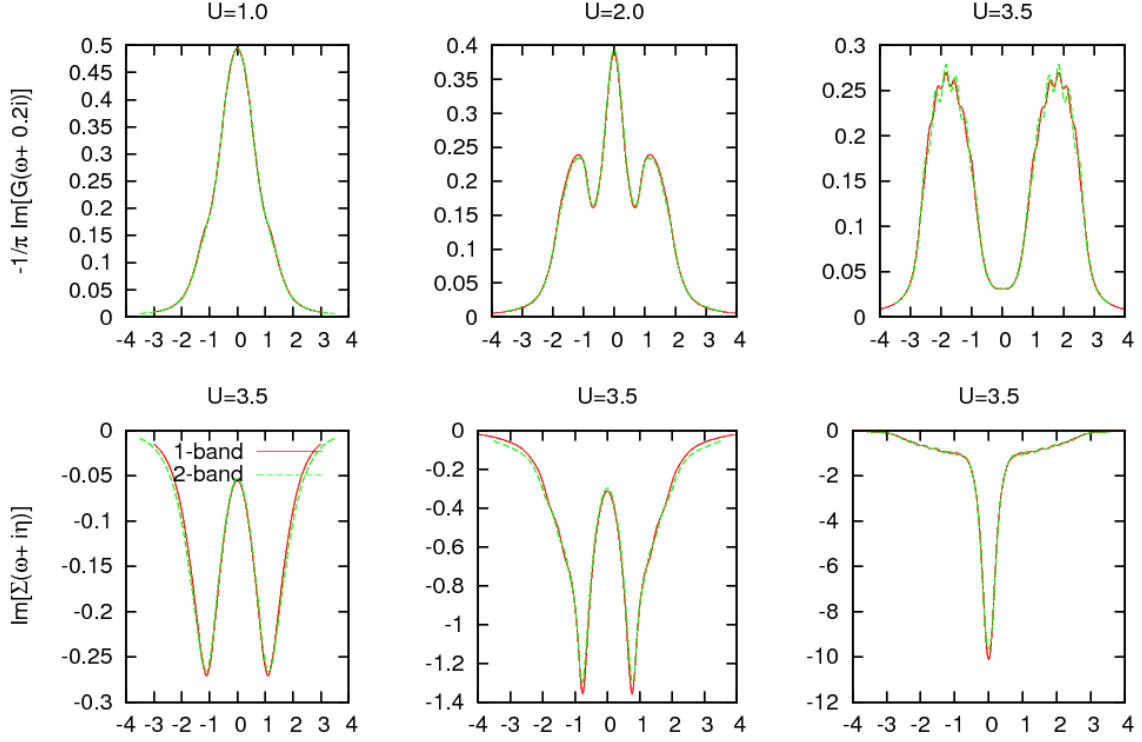


Figura 5.8: Comparación de la G y Σ como funciones de ω para $U_{12} = 0, 2U$ (línea continua) con el caso de una banda (línea discontinua). Observamos un alto grado de coincidencia, mostrando que las dos bandas se comportan como si estuvieran desacopladas. El ensanchamiento lorentziano es $\eta = 0,2$ y a esto se debe que $\text{Im}[\Sigma]|_{\omega=0} \neq 0$.

Llama la atención la estructura de tres picos que aparece en los casos $U_{12}/U = 0,8$ ó $0,9$ que corresponde al caso cuando la excitación interorbital es dominante y no llega a ser $U - U_{12} = 0$. Los dos picos secundarios se ubican justamente en $U - U_{12}$, lo cual nos avala la explicación. Un estudio detallado de este mecanismo se hace en la [Sección 5.5](#).

Otro fenómeno interesante relacionado con la transición metal-aislante es el orden de la transición. En la [Figura 5.10](#) se muestra un ejemplo que sugiere que ocurre un salto abrupto en el pico central para $U_{12} = 0,9U$, diferente al caso simétrico $U_{12} = U$. Un estudio más sistemático se muestra en la [Figura 5.11](#).

5.4.3. Bandas diferentes y transición de Mott selectiva

Presentamos resultados de la transición de Mott con diferentes anchos de banda $t_1 > t_2$. Para ciertos parámetros, y con $t_{12} = 0$, obtenemos la transición selectiva de Mott, que además es robusta en presencia de un pequeño hopping interorbital $t_{12} > 0$.

También encontramos una región interesante de la fase selectiva (OSM) donde aparecen cuasipartículas dentro del gap, discutidas en la [Sección 5.5](#), lo cual no se había observado hasta ahora.

En la [Figura 5.12](#), panel izquierdo, mostramos la DOS para un valor finito del acoplamiento de Hund J , para una forma invariante de rotación de la interacción de

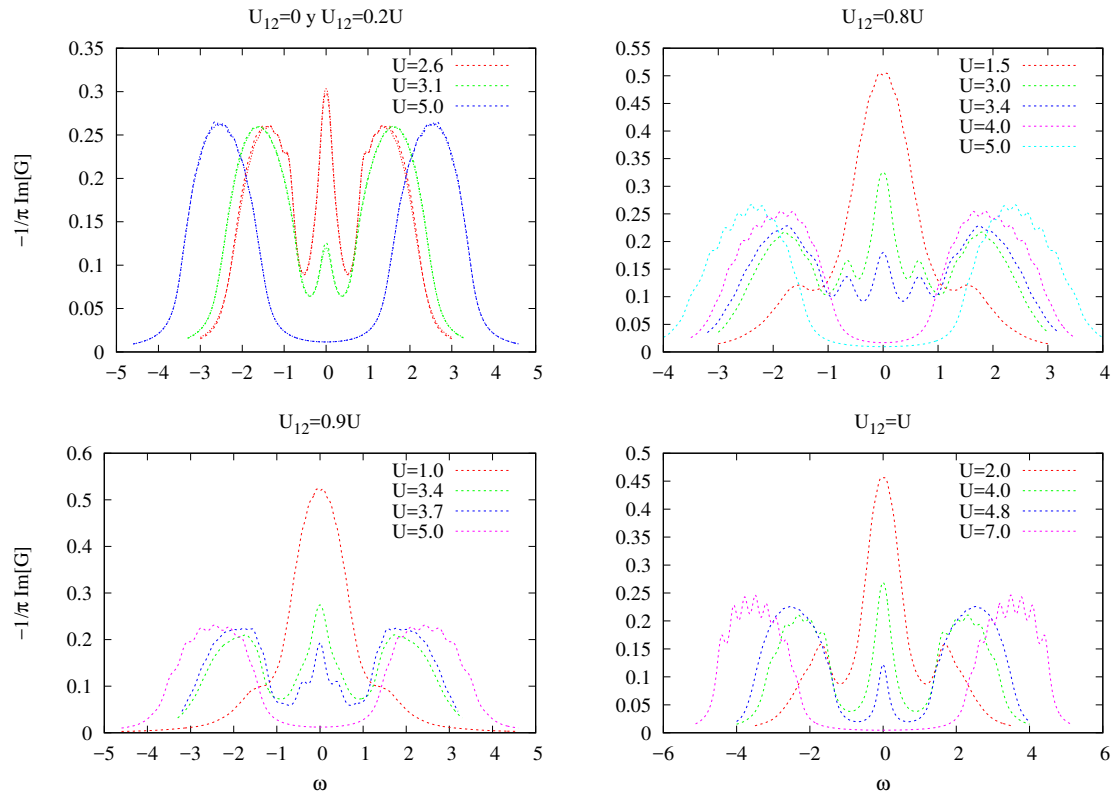


Figura 5.9: Densidad de estados cerca de la transición metal-aislante para $U_{12}/U = \{0, 2; 0, 8; 0, 9; 1\}$. Las dos bandas son idénticas y $J = 0$. Nótese la estructura central tipo 3 picos para $U_{12}/U = 0, 8; 0, 9$ que hace una diferencia respecto a las otras dos y que guarda relación con las cuasipartículas que estudiamos cuando se consideran dos bandas diferentes.

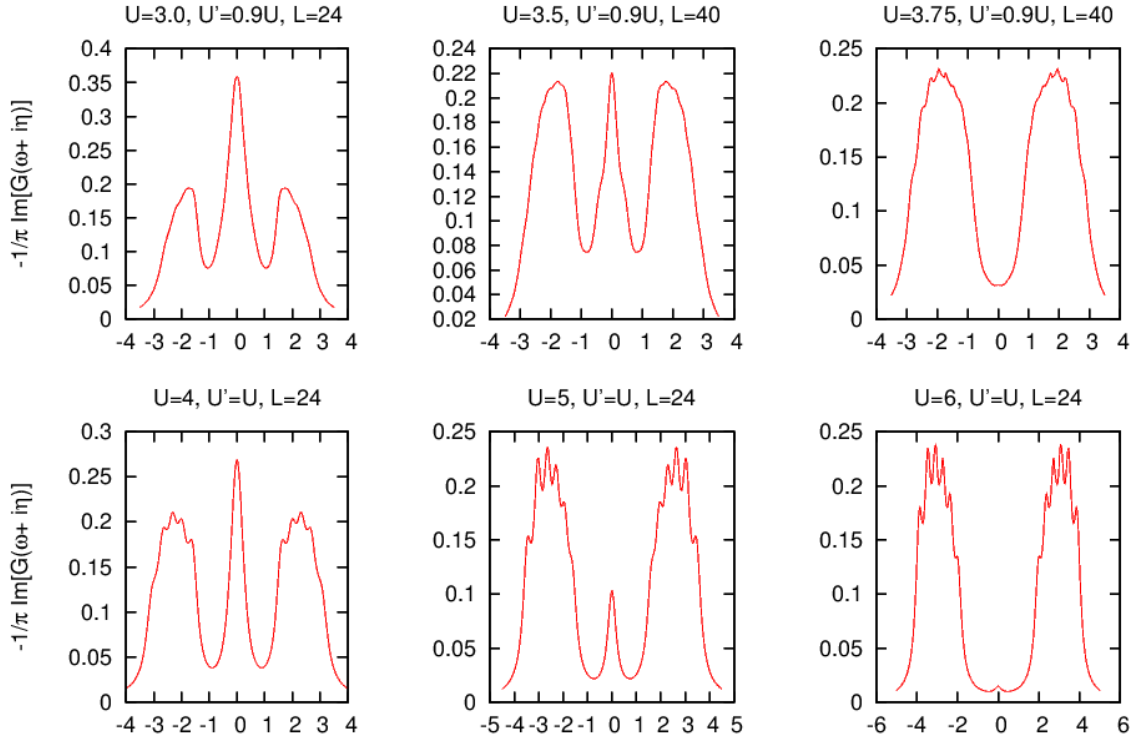


Figura 5.10: Comparación de la DOS en función de ω para $U_{12}/U = 0,9$ (arriba) y $U_{12}/U = 1$ (abajo). Se observó un especie de salto discontinuo en el pico central al aumentar U para $U_{12}/U = 0,9$, diferente a lo que ocurre en $U_{12}/U = 0,2$ y $U_{12}/U = 1$. En la figura U' se refiere a U_{12} .

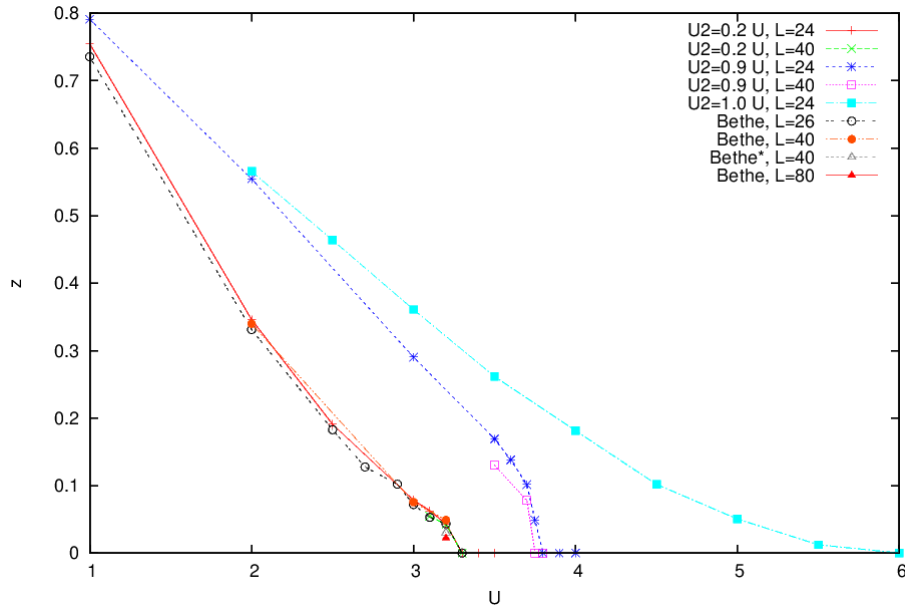


Figura 5.11: Estudio de la transición metal-aislante. Se observa un salto del peso de cuasipartícula Z para $U_{12}/U = 0,9$, sugiriendo una transición de primer orden; este resultado también es sugerido en un estudio similar usando bosones esclavos y CTQMC [5].

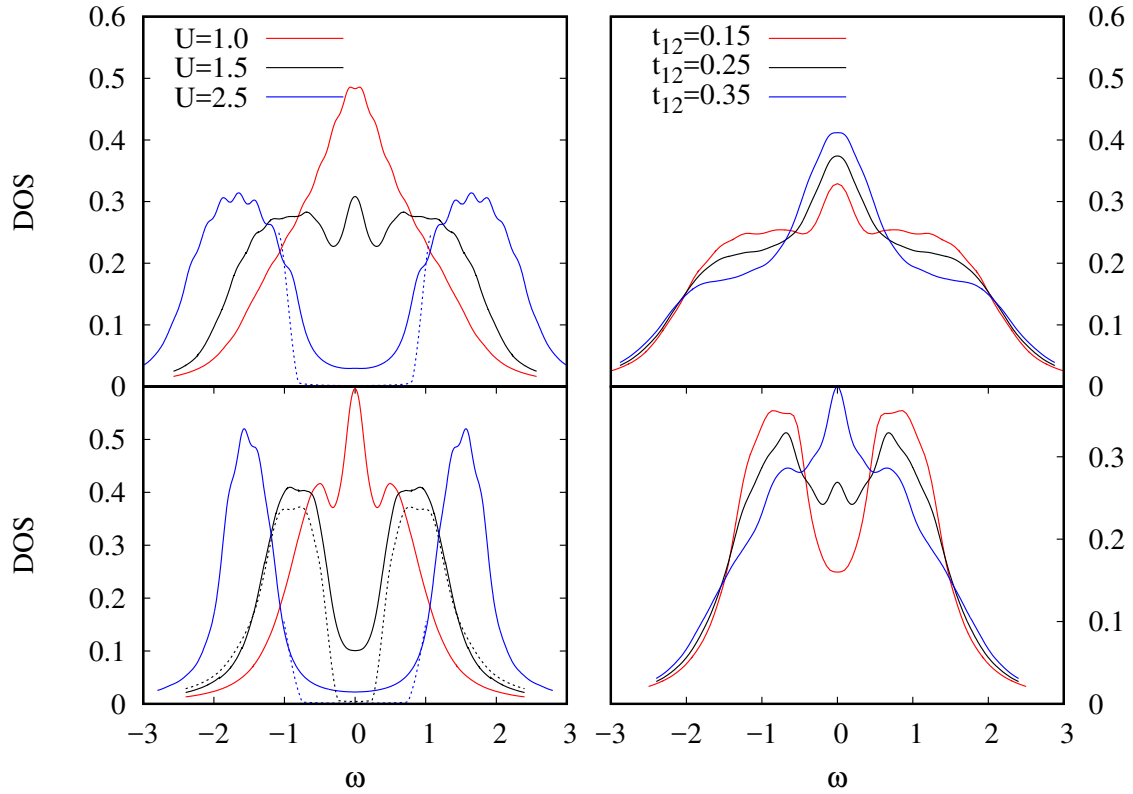


Figura 5.12: DOS para el modelo de Kanamori-Hubbard semilleno en la red de Bethe, mostrando la transición de Mott selectiva en orbital. Usamos $t_2 = t_1/2$, $J = U/4$, $U_{12} = U - 2J$. El panel superior (inferior) corresponde a la banda 1 (2). A la izquierda: cambiando U para $t_{12} = 0$. A la derecha: cambiando t_{12} para $U = 1,5$. Se muestran dos valores de ensanchamiento lorentziano η para enfatizar la región del gap en la fase aislante.

Coulomb y sin hibridización interorbital. Se ve claramente el carácter metálico de la banda más ancha y el carácter aislante de la banda estrecha, como también se ve en la parte imaginaria de la Σ , y en perfecto acuerdo con los resultados de Winograd y de Medici [73].

Consideremos el caso $J = 0$. Estudiaremos el caso con interacción invariante rotacional $U = U_{12}$ más adelante, no obstante, señalamos que no aparece OSM, coincidiendo con lo reportado en [74]. Sin embargo, para una interacción interorbital menor $U_2 = 0,9U$, moviendo el U , encontramos la fase selectiva, donde la banda ancha es metálica mientras que la banda angosta es aislante, ver Figura 5.13 (la $\text{Im}[G_{22}]|_{\omega=0} \neq 0$ debido solamente al valor finito de $\eta = 0,16$, ver por ejemplo Figura 5.15). Es interesante notar aquí los dos picos cercanos a la energía de Fermi en la banda 2. Estos picos desaparecen cuando la relación U_{12}/U está por debajo de un umbral del orden de 0.5, aún cuando la transición selectiva de Mott esté presente.

Cuando ocurre la transición a la fase aislante (de ambos orbitales) estos picos desaparecen simultáneamente (tanto el pico de Kondo en la banda 1 como los laterales en la banda 2), mostrando que todos ellos forman parte del comportamiento coherente metálico.

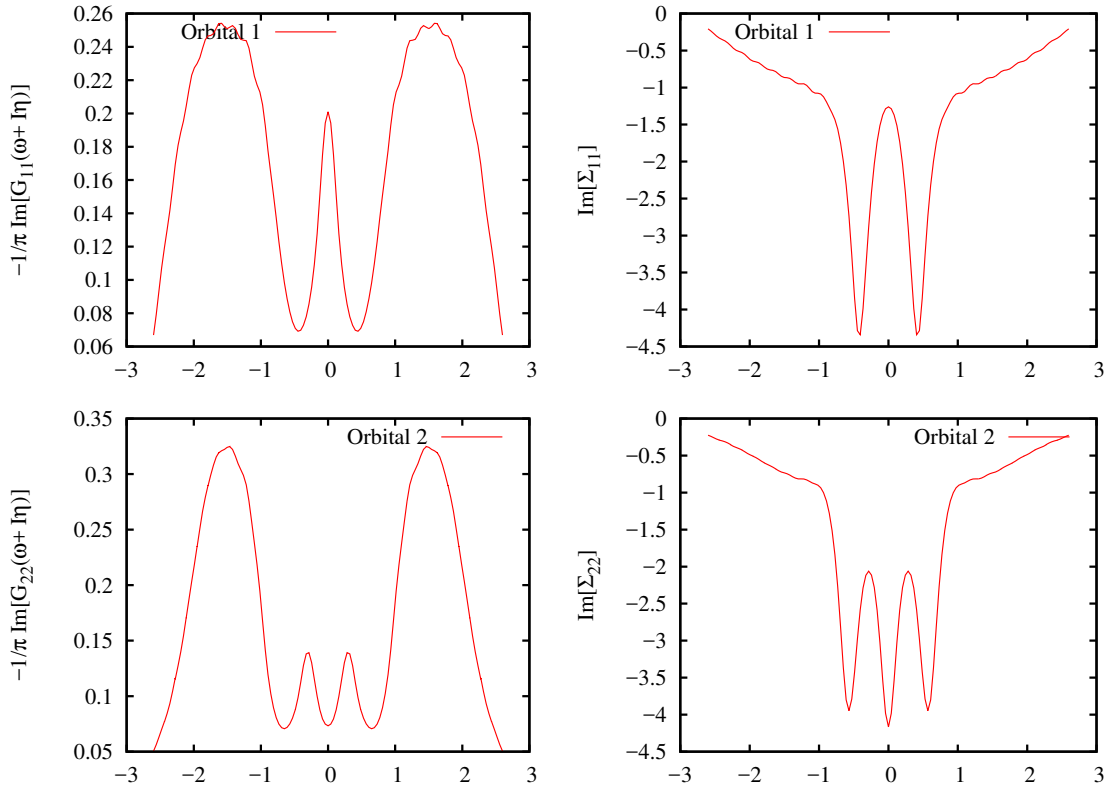


Figura 5.13: DOS en función de ω para $t_2 = t_1/2$, $U = 1,5$, $t_{12} = 0$ (como en Figura 5.12) pero con $J = 0$, $U_2 = 0,9U$. Se obtiene una combinación metal aislante tipo OSM. Notar la estructura intra-gap que aparece en el orbital aislante.

5.4.3.1. Efectos de la hibridización inter-banda t_{12}

Hay resultados contradictorios en la literatura acerca de si la fase selectiva es afectada por una hibridización interbanda t_{12} . Un análisis simplificado nos lleva a que el pico metálico en la banda 1 genera también un pico metálico en la banda 2 por el movimiento de electrones entre ellas ($t_{12} \neq 0$). Esto es, como la banda 1 es metálica, en ella puedo encontrar huecos en el orbital 1, que eventualmente pueden hacer saltar el electrón del orbital 2 del mismo sitio (dado que $t_{12} \neq 0$), así que tendríamos huecos también en el orbital 2, y por tanto podríamos crear un electrón sin pagar la interacción de Coulomb intraorbital U y la banda 2 sería metálica. Sin embargo, dos trabajos recientes [73, 74] muestran que la OSM sobrevive a valores moderados de t_{12} para un modelo como el que estamos estudiando. Nosotros encontramos, en efecto, que la OSM es robusta ante t_{12} para el caso de $J = U/4$ finito, como se ve en la Figura 5.12, panel derecho. No consideramos este resultado como concluyente, más bien se debe hacer un estudio numérico más exhaustivo sobre todo disminuyendo el ensanchamiento lorentziano η . No obstante, y defendiendo la persistencia de la fase selectiva con t_{12} , al análisis simplificado de arriba podemos agregar que no se tuvo en cuenta la interacción interorbital U_{12} y J al crear un electrón nuevo en un orbital 2 dado que el de éste se había desplazado al orbital 1. Esta repulsión atenta contra el carácter metálico en la

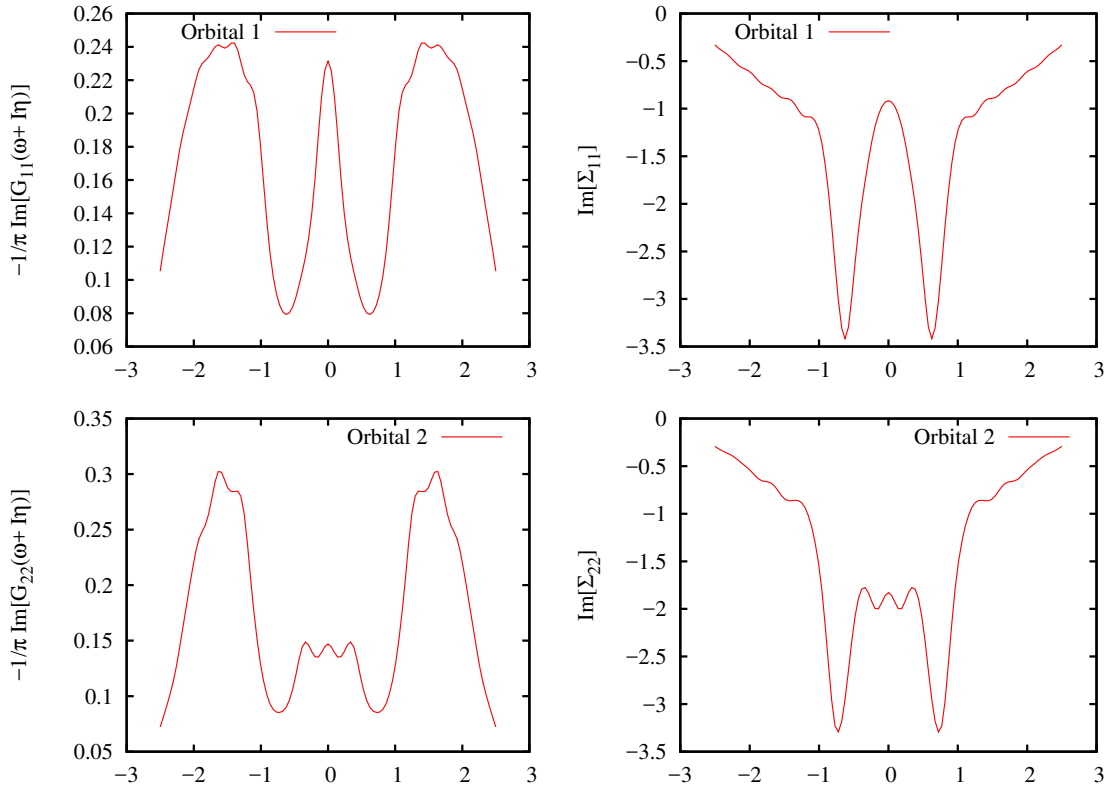


Figura 5.14: DOS en función de ω para $t_2 = t_1/2$, $t_{12} = 0$, $U = 1,5$, $J = 0$, $U_2 = 0,9U$ (como en Figura 5.13) pero con un pequeño valor $t_{12} = 0,05$. Se pierde la fase OSM.

banda 2 y podría competir o superar al mecanismo de hibridización interbanda.

Por otro lado, para el caso $J = 0$, $U_{12} = 0,9U$, tenemos que tan solo una pequeña hibridización $t_{12} = 0,05$ es suficiente para romper la fase OSM y crear un metal correlacionado en la banda estrecha cuando se considera, ver Figura 5.14.

Dejamos para próximos trabajos el estudio sistemático de los distintos parámetros que nos permitan concluir sobre el efecto de t_{12} .

5.5. Cuasipartículas hueco-doblón interbanda

La motivación comenzó con la Figura 5.13, donde se observan unos picos en la zona del gap del orbital 2. Tomamos de nuevo $J = 0$, $U_{12} < U$, $t_2 = t_1/2$, $t_{12} = 0$ y aumentamos U hasta ver la transición selectiva. Esta vez calculamos la DOS usando valores del ensanchamiento η mucho más pequeños para lograr mayor resolución (ver Figura 5.15, el desdoblamiento del pico central es efecto de tamaño finito). La aparición de picos laterales en las fases metálica y selectiva, es notoria. La energía de excitación es aproximadamente $\Delta = U - U_{12}$ (ver también Figura 5.16). Esto directamente nos lleva a retomar las excitaciones interorbital del límite atómico Tabla 5.1. Como describimos más adelante, identificamos estos picos como dos nuevas quasipartículas presentes en el sistema: los huecos y doblones en la banda 1 (2) generan estados de quasipartícula

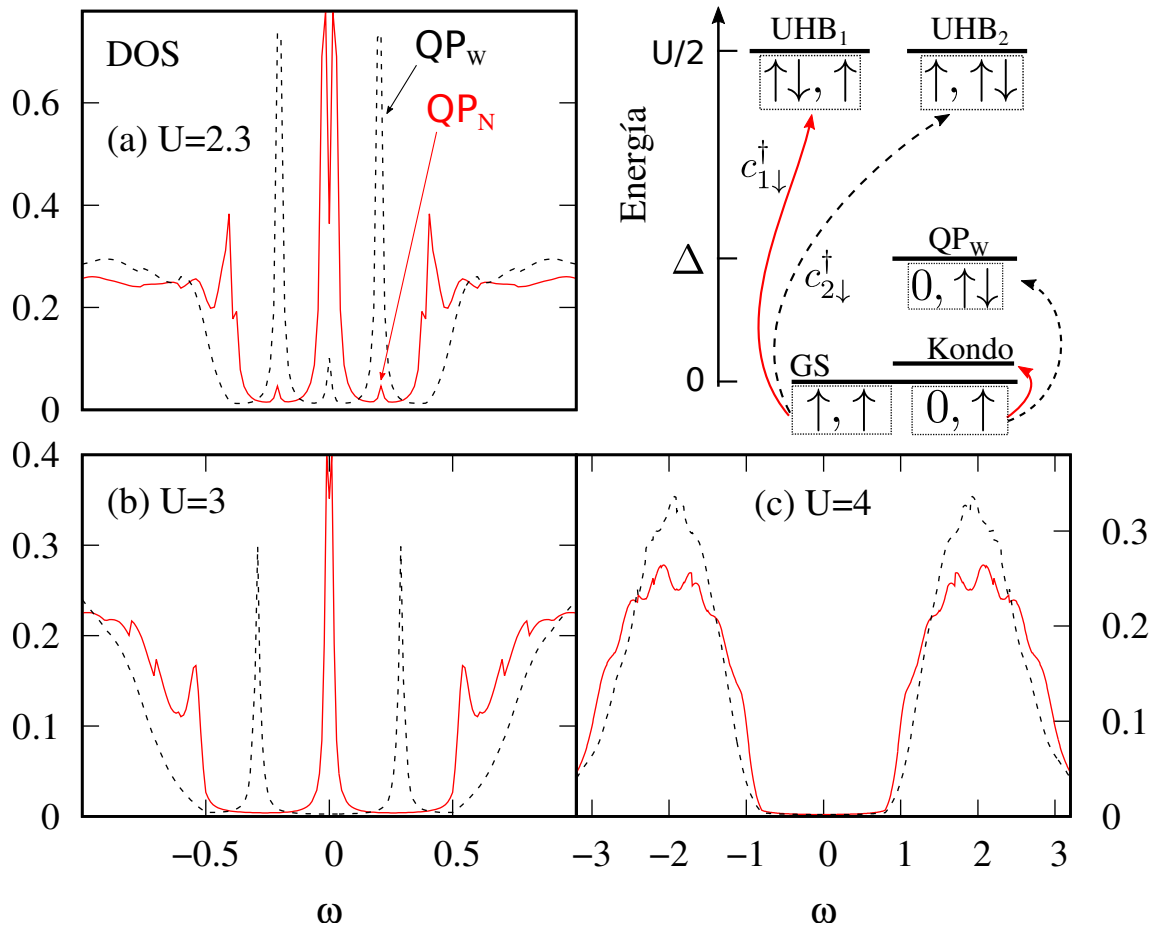


Figura 5.15: DOS como función de U para $\Delta = U - U_{12} = 0,3$, $t_2 = t_1/2$. (a) completamente metálico (aquí $\Delta = 0,2$ para mejor visualización) donde se muestran ambas QP, (b) Fase orbital selectiva, mantiene sólo QP_W , (c) Estado completamente aislante (notar las diferencias en el eje de energía). En línea continua la banda 1, y en discontinua la banda 2. El esquema muestra los estados relevantes a nivel atómico que participan en cada una de las características principales de la DOS en la fase OSM: el pico central de Kondo, los picos laterales dentro del gap y las bandas de Hubbard.

QP_W (QP_N) que se ven como picos en la banda 2 (1). En esta notación, la letra W la tomamos del inglés *wide* (ancho) porque las cuasipartículas provienen de la banda ancha, mientras que la letra N , del inglés *narrow* (angosto) la usamos porque las cuasipartículas provienen de la banda angosta. El mecanismo concreto, de cómo estas excitaciones atómicas se manifiestan en la red, se ilustra en el esquema de la [Figura 5.15](#) y se explica a continuación.

Retomemos la [Tabla 5.1](#). La configuración atómica más abundante en el estado colectivo tanto en el metal como en el aislante debe ser la semillena (2 electrones, uno en cada orbital, tipo $|\uparrow, \uparrow\rangle$) por su menor valor energético. Si, por ejemplo, la banda 1 es metálica significa que podemos, además, encontrar configuraciones con un hueco a nivel atómico del tipo $|0, \uparrow\rangle$ en el estado fundamental. Consideremos el espectro de creación de una partícula: a partir de estas configuraciones de 1 electrón se puede crear alguna configuración de 2 electrones. En particular si se crea la $|\downarrow, \uparrow\rangle$ (a través de $c_{1\downarrow}^\dagger$)

entonces encontramos una configuración de llegada de igual energía atómica que la de partida y tenemos una resonancia en $\omega = 0$ (tipo Kondo). En cambio, si partiendo de la configuración de 1 electrón se crea la configuración *hueco-doblón* ($|0, \uparrow\downarrow\rangle$) (a través de $c_{2\uparrow}^\dagger$) tenemos una diferencia energética $U - U_{12}$ respecto al $|\uparrow, \uparrow\rangle$ de partida, y esto explica la posición de nuestros picos. Este mecanismo es avalado con la diagonalización exacta para un sistema pequeño en [Subsección 5.5.1](#).

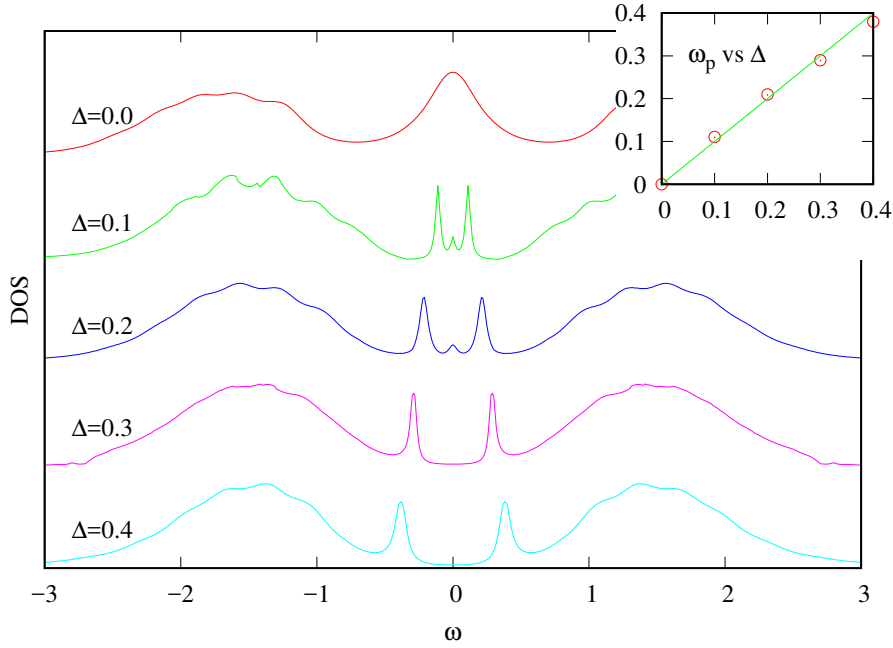


Figura 5.16: Dependencia de la posición ω_p del pico de la QP_W con Δ en la banda angosta; $U = 3$ y $t_2/t_1 = 0,5$. Para Δ pequeño el sistema es metálico. Recuadro: Dependencia lineal de ω_p vs Δ .

Podemos concluir que las QPs en una banda tienen el mismo origen que el pico central en la otra. Esto explica por qué no se ven en la banda 1 en la situación selectiva, dado que la banda 2 es aislante y no tiene configuraciones del tipo $|\uparrow, 0\rangle$. También por qué en el aislante todas las estructuras dentro del gap desaparecen.

Adicionalmente encontramos una correlación sugerente entre los picos: el peso del pico metálico es aproximadamente dos veces el peso del pico de cada QP en la otra banda (ver [Figura 5.15\(a\)](#)). Este es otro indicio de la correspondencia. Las QP existen también para anchos de banda iguales ($t_1 = t_2$), y ahora las podemos ver claramente como los tres picos presentes en la ya visitada [Figura 5.9](#).

Para verificar la naturaleza hueco-doblón de los estados ligados calculamos el espectro de excitación de $G_W^> = \langle a_W(\omega + i\eta - H_{imp})^{-1} a_W^\dagger \rangle$ donde el operador $a_W^\dagger = (1 - n_{1\uparrow})(1 - n_{1\downarrow})n_{2\downarrow}c_{2\uparrow}^\dagger$ actúa en el estado fundamental y crea un doblón en la banda 2 cuando hay un hueco en la banda 1, creando por tanto una QP_W (para QP_N intercambiar 1 y 2). Para calcular $G_W^>$ usamos diagonalización exacta con el hamiltoniano que se obtiene del ciclo DMFT convergido para un sistema de 8 sitios. En la [Figura 5.17](#)

graficamos el espectro de estos operadores (curvas azul y verde, unidades arbitrarias). En la situación OSM (panel izquierdo) sólo tenemos QP_W en correspondencia con los picos de $G_W^>$ en la banda 2, verificando el origen hueco-doblón de estas excitaciones.

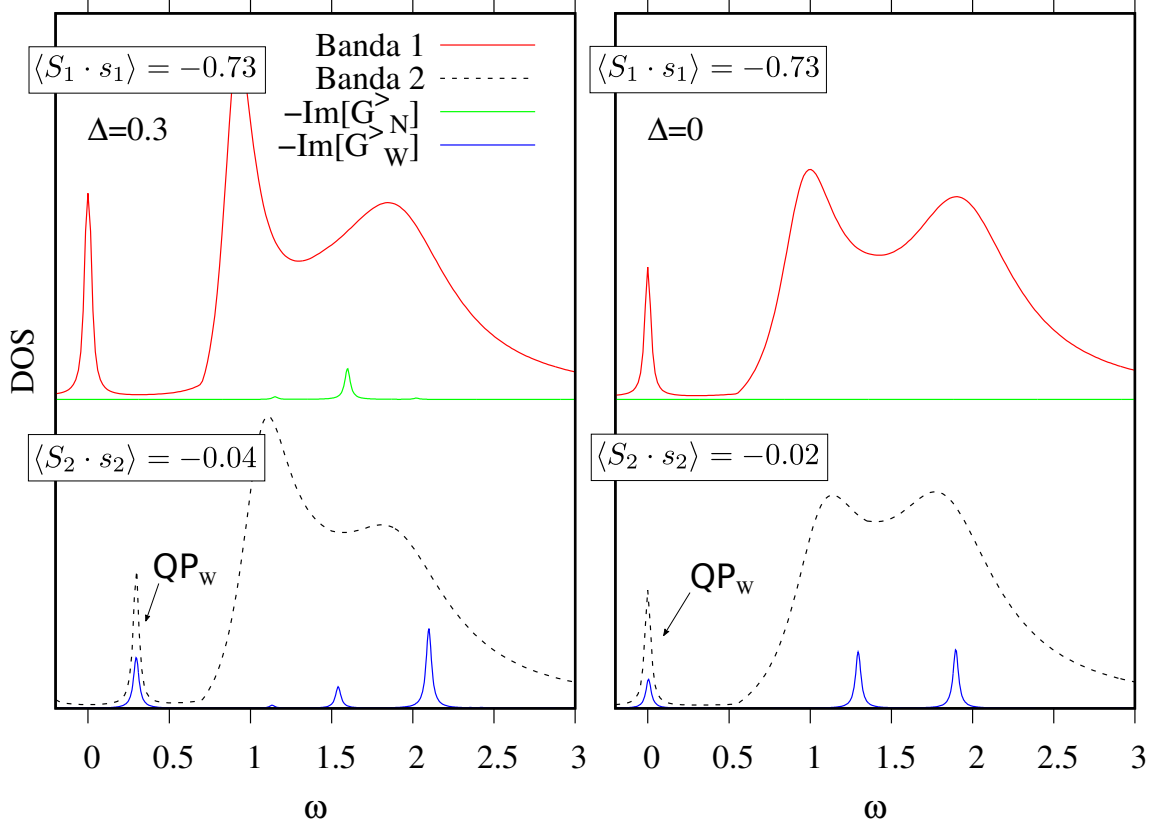


Figura 5.17: DOS de un sistema con $L = 8$ sitios (3 sitios de baño por orbital de impureza) calculado usando diagonalización exacta. La línea continua verde (azul) corresponde al espectro de excitación de $G_W^>$ ($G_N^>$, ver texto) representando los pares hueco-doblón entre bandas. Los picos de QP corresponden a estas excitaciones. A la izquierda: $U = 3$, $\Delta = 0,3$ y $t_2 = 0,5t_1$. A la derecha: $U = 3,1$, $\Delta = 0$ y $t_2 = 0,02t_1$. También mostramos la correlación espín-espín $\langle S_I \cdot s_{\text{baño}-I} \rangle$ (con $I = 1, 2$) en el fundamental y se ve que el pico central en la banda 1 es tipo Kondo mientras que en la banda 2 no lo es.

Así, los picos de QP en una banda surgen cuando, para el estado fundamental, hay huecos o doblones en la otra (o sea, es metálica). Cuando una banda se convierte en aislante, no hay huecos ni doblones disponibles y las QP no se forman en la otra banda, en concordancia con lo que ya hemos observado.

Hay reportes previos sobre pares holón-doblón en modelos relacionados, pero a energías más altas y en la parte interior de las bandas de Hubbard, unido a ellas (también presentes en nuestros resultados, ver en [Figura 5.15a](#)) y b) los picos en $\omega \gtrsim 0,5$). Recientemente se entendió [\[75\]](#) que estos pares se forman entre sitios vecinos en la red y aparecen también en el problema de una banda, por tanto son de otra naturaleza. Hay otros reportes de pares holón-doblón en estados meta-estables fuera de equilibrio [\[76, 77\]](#).

Caso invariante rotacional $U = U_{12}$. Como se ve en la [Figura 5.16](#), cuando $\Delta = 0$ (que corresponde a $J = 0$ en el modelo Kanamori-Hubbard), los dos picos de QP se unen en la energía de Fermi y la banda 2 va a tener una DOS finita a esta energía siempre que la banda 1 sea metálica. De hecho, en este límite, nosotros no encontramos fase OSM para ninguna proporción entre los anchos de banda t_2/t_1 . Para esta interacción altamente simétrica ($U_{12} = U$) encontramos que ambas bandas, incluso con anchos de bandas muy diferentes, se bloquean la transición una a la otra (ver [Figura 5.18](#)), y ambas transicionan al estado aislante simultánea y continuamente al aumentar U .

En la [Figura 5.18](#) mostramos la dependencia del peso de cuasipartícula de cada banda $I = 1, 2$ definido como $Z_I^{-1} = 1 - dRe[\Sigma_I(\omega)]/d\omega|_{\omega=0}$ para tres valores de t_2/t_1 , describiendo la transición simultánea de ambas bandas. De aquí es claro que, para t_2/t_1 muy pequeño (ausencia de mecanismo de Kondo en la banda 2, como explicaremos más adelante) el pico QP_W en la banda 2 en $\omega = \Delta = 0$ genera el mismo peso que el pico de Kondo que lo origina en la banda 1 ($Z_1 = Z_2$). Cuando $t_2 \sim t_1$ ambos mecanismos, Kondo y QP, están activados en cada banda, y el pico correspondiente en la energía de Fermi se incrementa en peso. Como consecuencia, cuando la relación de anchos de banda crece hasta 1, la interacción crítica para la transición metal-aislante se incrementa hasta llegar al valor crítico (alto) del modelo totalmente simétrico [\[78\]](#).

También se muestra la DOS para una relación pequeña ($t_2/t_1 = 1/50$) cerca de la transición donde se ve claramente una DOS finita en la energía de Fermi para ambas bandas. Es llamativo lo que pasa en las bandas de Hubbard: la banda 1 presenta la bien conocida forma semicircular para la red de Bethe mientras que la banda angosta es casi triangular y con el mismo soporte que la banda ancha W (causado por la interacción inter-banda U_{12} ; si $U_{12} = 0$ el soporte sería t_2/t_1 veces más chico).

Un rasgo muy interesante para esta relación extremadamente pequeña de anchos de banda es que los picos a energía cero corresponden a diferentes tipos de excitaciones: tipo Kondo (intercambio de espín) en la banda 1 y hueco-doblón inter-banda en la banda 2 (QP_W). Esta diferencia se muestra en la [Figura 5.17](#) donde calculamos, en el estado fundamental, la correlación espín-espín entre los sitios efectivos de impureza de cada banda y sus baños correspondientes $\langle \mathbf{S}_I \cdot \mathbf{s}_{\text{baño}-I} \rangle$, $I = 1, 2$. Esta correlación es aproximadamente $-3/4$ para el estado singlete de Kondo en la banda 1 y casi cero para 2, mientras que la función respuesta hueco-doblón en $\omega = 0$ es cero para la banda 1 y tiene un pico para la banda 2, ver panel derecho. No hay huecos (doblonos) libres a baja energía en la banda angosta porque siempre están enlazados con doblones (huecos) en la banda ancha; mientras que sí encontramos huecos y doblones libres en la banda ancha metálica.

Finalmente, señalamos que nuestros resultados sobre la ausencia de transición selectiva para $U = U_{12}$ están en concordancia con los trabajos [\[79–81\]](#) pero no con [\[82?, 83\]](#), donde afirman que si $t_2/t_1 < 0,2$ habría una transición selectiva, aunque con una

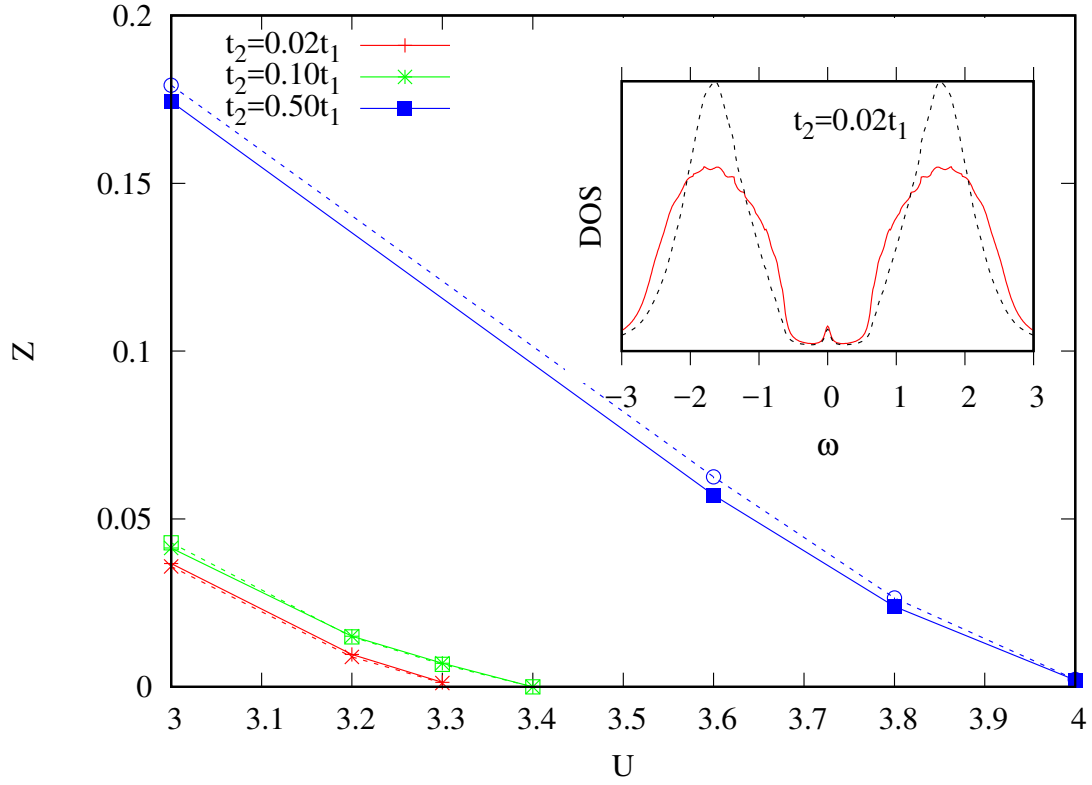


Figura 5.18: Pesos de cuasipartícula Z en cada banda (banda 1, línea continua; banda 2, línea punteada) vs U para $\Delta = 0$, $t_2 = 0,02t_1$, $t_2 = 0,1t_1$ y $t_2 = 0,5t_1$ mostrando una transición de metal a aislante simultánea incluso para una relación de anchos de bandas muy pequeña. Recuadro: DOS para $t_2 = 0,02t_1$ mostrando los picos en la energía de Fermi cerca de la transición para $U = 3,3$ (línea continua: banda ancha; línea punteada: banda angosta).

DOS finita cerca de la energía de Fermi en la banda aislante. Nuestros hallazgos nos llevan a concluir que esto corresponde, de hecho, a la estructura de nuestro pico central en la banda angosta, que ellos ven dividida por los métodos aproximados que usaron. Cuando $U_{12} \lesssim U$ (suponiendo $t_2 \ll t_1$), ambos picos QP se solapan (siempre y cuando sus anchos $\sim Z_1 t_1 \sim \Delta$) y puede haber una transición selectiva a partir de un valor crítico de Δ .

5.5.1. Mecanismo

Para entender la naturaleza de estas cuasipartículas hemos diagonalizado un hamiltoniano pequeño que incluye a la impureza y un sitio de baño para cada una (límite de ancho de banda 0) que imita la solución DMFT. Después de mostrar que este sistemita captura la física de las nuevas QP, procedemos a su análisis detallado.

Los autoestados del hamiltoniano pueden ser escritos en términos de una base $|i_1\rangle|i_2\rangle|b_1\rangle|b_2\rangle$, donde el primer y segundo índices (i_1 and i_2) representan los orbitales de impureza de las ecuaciones DMFT y el tercero y cuarto índices son los correspondientes estados del baño (ver recuadro de la [Figura 5.19](#)). Los índices corren por 4

estados $\{0, \uparrow, \downarrow, d\}$ con $d = \uparrow\downarrow$.

Sintonizamos la transición de “Mott” cambiando los parámetros de hopping t_1, t_2 , mientras mantenemos $U = 3$ y $\Delta = 0,3$. La Figura 5.19 reproduce, de manera muy sencilla, nuestros resultados DMFT para la transición selectiva, con funciones delta en la posición de los picos (nótese la estructura dividida para el pico central coherente derivada de la finitud del sistema, [84]).

Si definimos el estado fundamental como:

$$|\Phi_0\rangle = \sum_{i_1, i_2, b_1, b_2} A_{i_1 i_2 b_1 b_2} |i_1, i_2\rangle |b_1, b_2\rangle,$$

podemos especificar los estados relevantes en cada caso (metálico, OSM y aislante) para $N = 4$ partículas (semilleno), energía E_0 y los parámetros en la Figura 5.19:

$$|\Phi_0\rangle \approx \begin{cases} \alpha \sum_{\sigma\sigma'} |\sigma, \sigma'\rangle |\bar{\sigma}, \bar{\sigma}'\rangle + \beta_1 \sum_{\sigma,x} |x, \sigma\rangle |\bar{x}, \bar{\sigma}\rangle + & \text{metal} \\ + \beta_2 \sum_{\sigma,x} |\sigma, x\rangle |\bar{\sigma}, \bar{x}\rangle + \gamma \sum_x |x, \bar{x}\rangle |\bar{x}, x\rangle & \\ \alpha \sum_{\sigma\sigma'} |\sigma, \sigma'\rangle |\bar{\sigma}, \bar{\sigma}'\rangle + \beta_1 \sum_{\sigma,x} |x, \sigma\rangle |\bar{x}, \bar{\sigma}\rangle & \text{OSM} \\ \alpha \sum_{\sigma\sigma'} |\sigma, \sigma'\rangle |\bar{\sigma}, \bar{\sigma}'\rangle & \text{aislante} \end{cases}$$

donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ y $x = 0, d$ y $\bar{\sigma}$ es el espín opuesto de σ , lo mismo con \bar{x} . Los coeficientes son $\alpha = \{-0,471; -0,485; 0,5\}$, $\beta_1 = \{0,123; 0,121; 0\}$, $\beta_2 = \{-0,124; 0; 0\}$, $\gamma = \{0,074; 0; 0\}$, correspondiendo a $\{\text{metal } t_1 = 0,2, t_2 = 0,1, \text{OSM } t_1 = 0,2, t_2 = 0,001, \text{aislante } t_1 = 0,002, t_2 = 0,001\}$, respectivamente, ver Figura 5.19.

Ahora introducimos el estado $|K_1\rangle$ con $N_p = 5$ partículas y energía $E_0 + \omega_1^K$, tal que $\langle K_1 | c_{1\downarrow}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ es el responsable del análogo en nuestro sistemita a la resonancia de Kondo en $\omega = \omega_1^K \sim 0$ para la banda 1². El estado principal para el estado es $|K_1\rangle \approx \alpha_1^K \sum_\sigma |\downarrow, \sigma\rangle |d, \bar{\sigma}\rangle$, que se deriva del término $\beta_1 \sum_{\sigma,x} |x, \sigma\rangle |\bar{x}, \bar{\sigma}\rangle$ en el estado fundamental. Los coeficientes numéricos son $\alpha_1^K = \{0,689; 0,701; 0,707\}$, y $\omega_1^K = \{0,08; 0,074; 0\}$. De forma similar, $\alpha_2^K = \{0,68; 0,686; 0,707\}$, y $\omega_2^K = \{0,027; 0; 0\}$ para la resonancia de Kondo en el orbital 2 (no hay para OSM y aislante).

Los nueva QP ligada QP_W (pico de QP en la banda 2) puede ser explicada introduciendo el estado $|W\rangle$ con 5 partículas y energía $E_0 + \omega^W$, tal que $\langle W | c_{2\downarrow}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ es responsable del pico a $\omega = \omega^W \sim \Delta$ en la banda 2. Aproximadamente, $|W\rangle \approx \alpha^W |0, d\rangle |d, \downarrow\rangle$ que deriva del término $\beta_1 \sum_{\sigma,x} |x, \sigma\rangle |\bar{x}, \bar{\sigma}\rangle$ en el estado fundamental. Nótese que $|W\rangle$ comparte su origen con $|K_1\rangle$, explicando sus pesos similares en nuestro cálculo DMFT. Los coeficientes concretos son $\alpha^W = \{0,969; 0,975; 1\}$, y $\omega^W = \{0,37; 0,336; 0,3\}$.

Análogamente, para la cuasipartícula equivalente QP_N (pico de QP en la banda 1) se introduce el estado $|N\rangle$, con 5 partículas y energía $E_0 + \omega^N$, el pico se origina de

²También se podría destruir un electrón, pero el razonamiento es similar y lo omitimos por simplicidad.

$\langle N | c_{1\downarrow}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ en $\omega = \omega^N \sim \Delta$ en la banda 1. Aproximadamente, $|N\rangle \approx \alpha^N |d, 0\rangle | \downarrow, d \rangle$ que deriva del término $\beta_2 \sum_{\sigma, x} |\sigma, x\rangle |\bar{\sigma}, \bar{x}\rangle$ en el fundamental. Los coeficientes son $\alpha^N = \{0,976; 0,987; 1\}$, y $\omega^N = \{0,394; 0,368; 0,3\}$.

Omitimos aquí la caracterización detallada de las bandas de Hubbard, bien descrita en la literatura, ver [84].

En conclusión, en el estado metálico tenemos un peso alto en configuraciones de la forma $|\sigma, \sigma'\rangle$ (mostramos sólo la parte de la impureza), pero también están presentes fluctuaciones de carga, teniendo una densidad apreciable de configuraciones con huecos y doble ocupación (tipo $|0, \sigma'\rangle$ ó $|d, \sigma'\rangle$), y que están involucradas en la resonancia de Kondo. Los estados en la “banda” superior de Hubbard (muy estrecha en esta descripción de ancho de banda cero) pueden ser explicados como una configuración doblemente ocupada itinerante (tipo $|d, \sigma'\rangle$) en un mar de sitios simplemente ocupados. Finalmente, los estados correspondientes a las QP_W se originan al crear una partícula en la banda 2, en las configuraciones con huecos o doble ocupación en la banda 1 (tipo $|0, \sigma'\rangle$) y tienen un peso alto en configuraciones de la forma $|0, d\rangle$, esto es, un par hueco-doblón entre las bandas³ con energía U en el límite atómico que se diferencia en $\Delta = U - U_{12}$ cuando se compara con la configuración $|\sigma, \sigma'\rangle$ (que es la de mayor peso en el estado fundamental, y tiene energía U_{12}). En la Figura 5.20 esquematizamos las configuraciones relevantes y procesos que generan las excitaciones principales (Kondo, QPs y bandas de Hubbard) para el estado metálico, OSM y aislante.

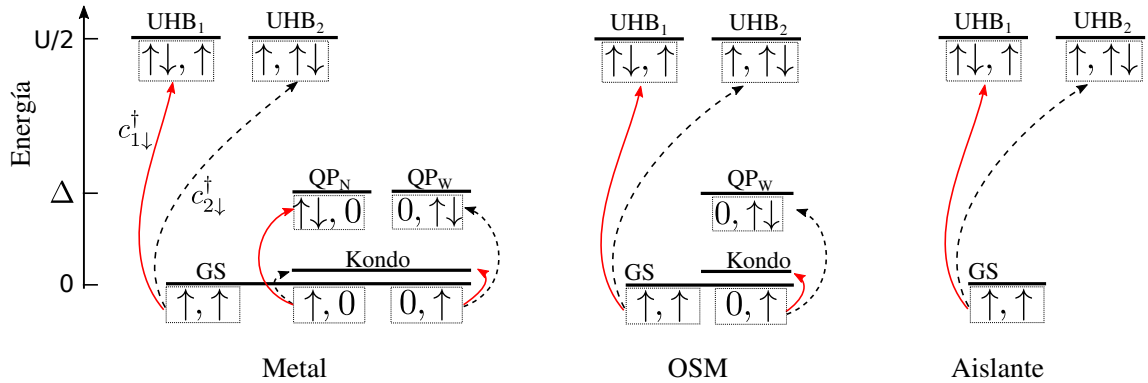


Figura 5.20: Esquema de las configuraciones relevantes de la impureza efectiva $|i_1, i_2\rangle$ (por claridad omitimos los sitios de baño) participantes en cada uno de los rasgos principales de la DOS: el pico central de Kondo, los picos de QP y la banda superior de Hubbard: a) metal, b) OSM (metal en banda 1, aislante en banda 2), c) aislante. Nótese que el operador de creación en la banda 1 (2) se representa con línea continua (discontinua). Los espines \uparrow sueltos también pueden ser \downarrow .

³Podría pensarse que por la simetría electrón-hueco igualmente hay pares doblón-hueco $|d, 0\rangle$, sin embargo, lo que estamos describiendo son las excitaciones de una partícula adicional en la banda 2 en este caso.

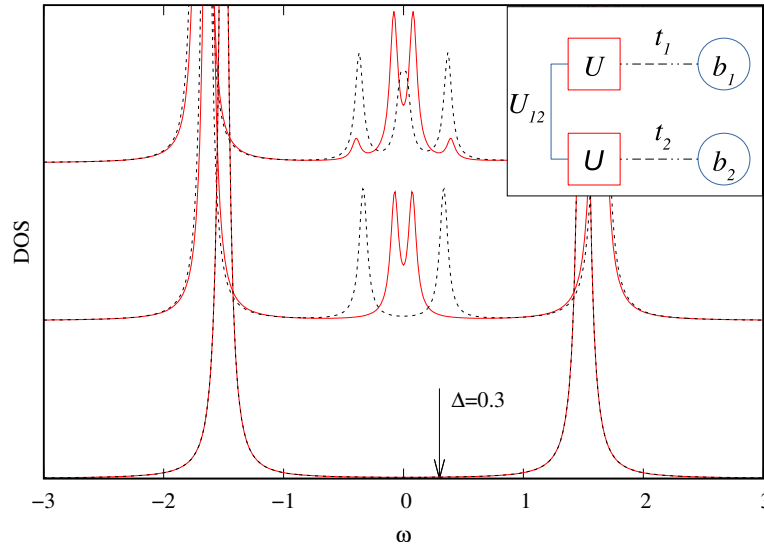


Figura 5.19: DOS para los estados metálico ($t_1 = 0,2, t_2 = 0,1$), OSM ($t_1 = 0,2, t_2 = 0,001$) y aislante ($t_1 = 0,002, t_2 = 0,001$), de arriba hacia abajo. Tomamos $U = 3$. La línea continua (discontinua) corresponde a la “banda” 1 (2). El pico central de Kondo está dividido por la finitud del sistema. Los picos de QP están ubicados a energía $\sim \Delta = 0,3$ y corresponden a pares hueco-doblón enlazados. En el recuadro mostramos un esquema del hamiltoniano de diagonalización exacta para interpretar los resultados DMFT: los cuadrados representan las impurezas y los círculos los sitios de baño.

5.5.2. Relación de dispersión, dopaje e interacción magnética

En la [Figura 5.21](#) presentamos el efecto del dopaje sobre la densidad de estados para la fase OSM. Encontramos que la fase OSM es robusta para un rango de potenciales químicos. Observamos que, a diferencia de las bandas de Hubbard, los picos de QP no cambian su posición respecto al potencial químico μ (situado en $\omega = 0$). Para entender esto retomamos el límite atómico ([Tabla 5.1](#)). En el estado fundamental, con dopaje moderado, la configuración atómica más abundante tiene dos partículas tipo $|\sigma, \sigma'\rangle$. Las bandas de Hubbard se originan de una excitación atómica con 3 partículas, por ejemplo, en la banda 1 tipo $|d, \uparrow\rangle$, mientras que las QP se originan de una excitación de 2 partículas tipo $|0, d\rangle$. El potencial químico afecta por tanto la energía de la excitación de Hubbard porque involucra una partícula más que la configuración más abundante. De igual forma, el μ no afecta a las QP. Por otro lado, encontramos una transferencia de peso espectral entre ellos. La banda metálica se dopa con μ [\[74\]](#), mientras que, en la fase OSM, el llenado permanece entero en la banda aislante hasta que un potencial químico crítico se alcanza, que es menor que en el caso completamente aislante.

Como en la red de Bethe no tenemos un \mathbf{k} de momento bien definido, para poder calcular la relación de dispersión (densidad de estados en función de ω y \mathbf{k}) de las QP, usamos la propuesta de [\[12\]](#) para obtener la DOS dependiente de ω y de e_k , esto es,

$$D(\omega, e_k) = \frac{1}{\omega + i\eta - e_k - \Sigma(\omega)}.$$

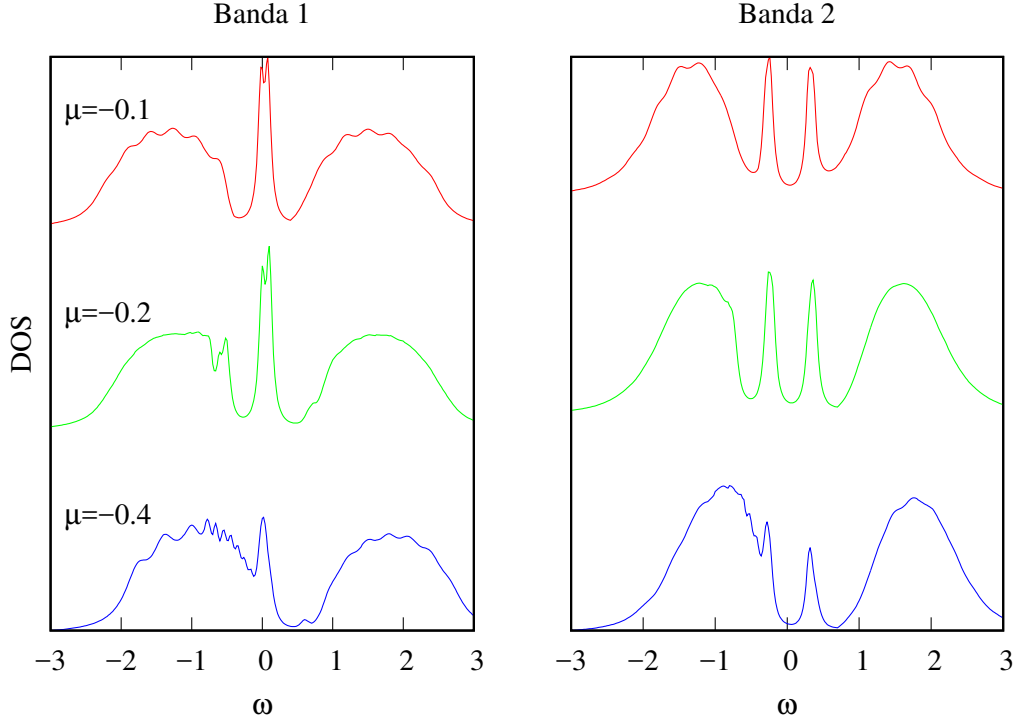


Figura 5.21: DOS en la banda 1 (izquierda) y 2 (derecha) para $U = 2,8$, $\Delta = 0,3$ cambiando el potencial químico μ (energías relativas a μ), donde podemos ver que los picos de QP no se afectan. Los llenados correspondientes para la banda metálica son 0.99, 0.98 y 0.89 de arriba hacia abajo. La banda 2 permanece semillena. Es interesante ver cómo los picos de QP, a diferencia de las bandas de Hubbard, permanecen exactamente en la misma energía relativa a la energía de Fermi.

Si la autoenergía es cero ($\Sigma(\omega) = 0$, por ejemplo a altas frecuencias) sólo aparece densidad de estados $-\frac{1}{\pi} \Im[D]$ en la recta $\omega - e_k = 0$. En la [Figura 5.22](#) mostramos la dispersión calculada para la situación de [Figura 5.15b](#). Observamos que los picos de QP dispersan muy poco al mantener un peso similar para los e_k no muy alejados de $e_k = 0$. Llama la atención la similitud entre la dispersión de los picos de QP y del pico de Kondo, siendo ésta otra evidencia del origen común de las respectivas excitaciones.

En la [Figura 5.23](#) pusimos un J muy chico, $J = 0,02U$, $U_{12} = U - 2J$, para estudiar el desdoblamiento de las QP. Se ve claramente que se desdobra el pico de Kondo metálico para la banda ancha y produce picos de QP también desdoblados en la banda angosta. La separación de los picos es $2J$, como debe ser del modelo atómico (ver por ejemplo, Fig. 3 de [\[85\]](#)). También, la posición del primer pico de QP está a una distancia $\Delta = U - U_{12} = 2J$. O sea que tenemos picos en 0 , $2J$ y $4J$.

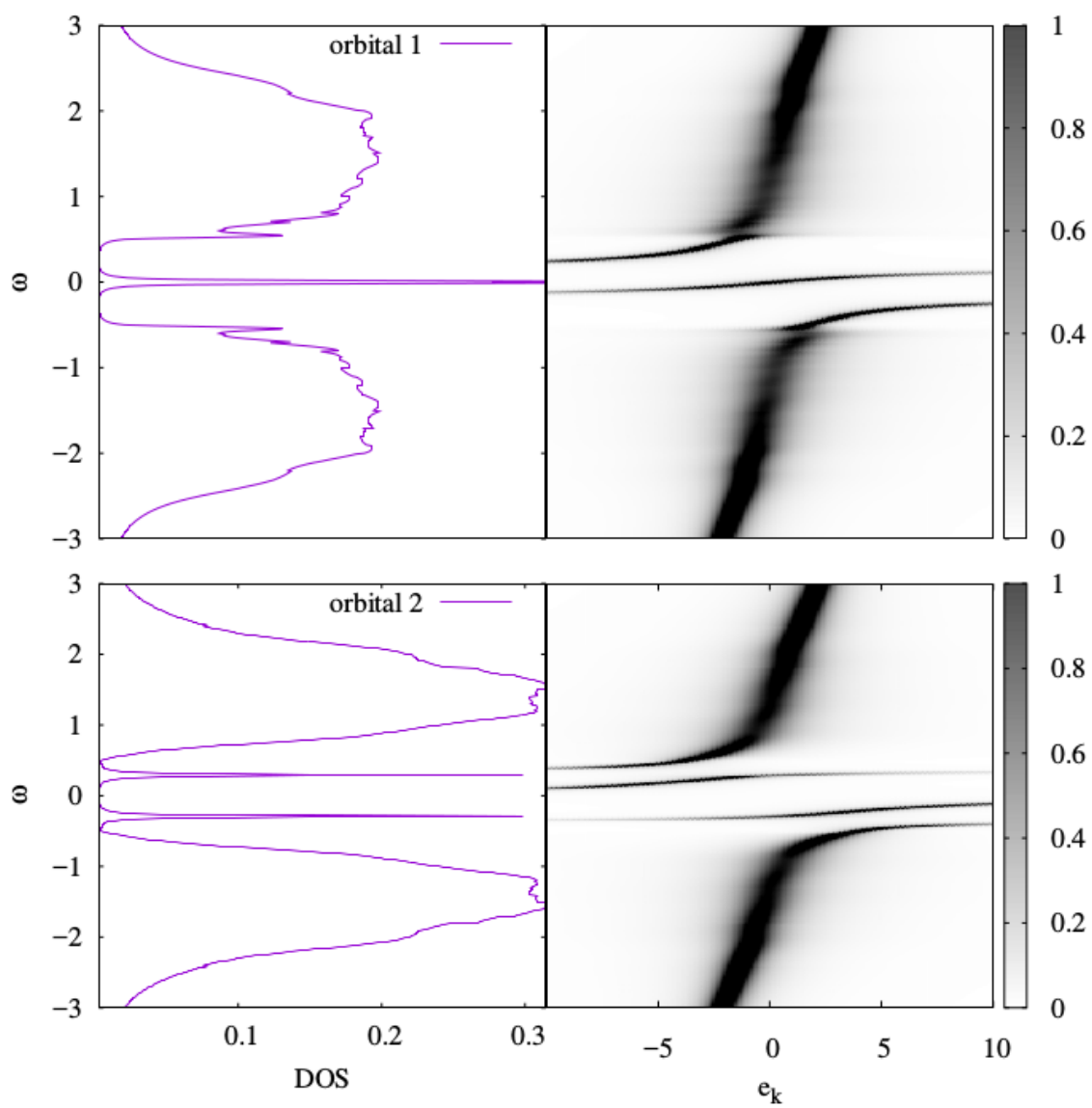


Figura 5.22: Izquierda: DOS con $J = 0$, $U = 3$, $U_{12} = 2,7$, $t_2 = t_1/2$. Derecha: relación de dispersión para esos parámetros.

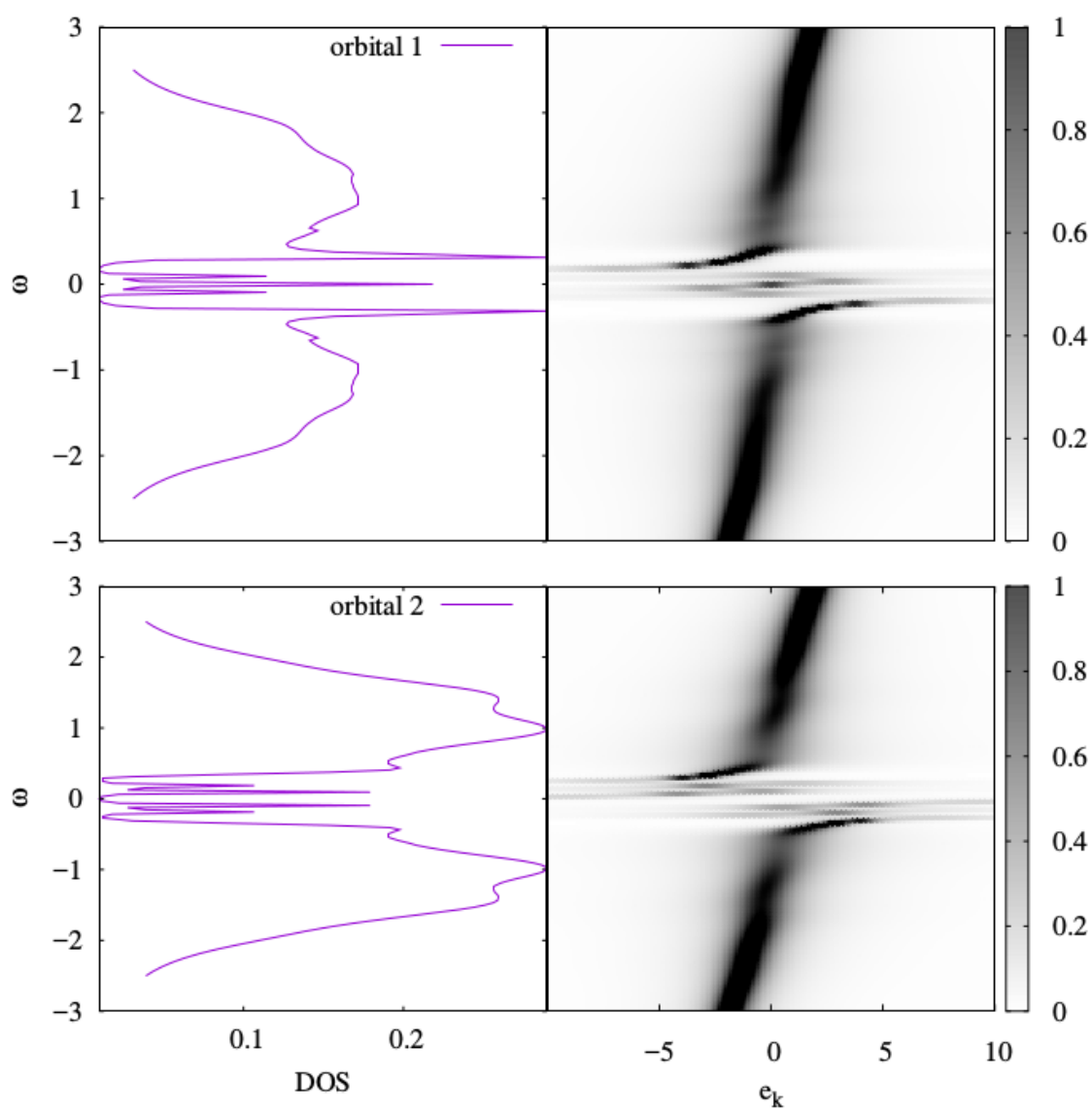


Figura 5.23: Izquierda: DOS para $U = 2,3$, $J = 0,02U$, $U_{12} = U - 2J$. Derecha: relación de dispersión. Las QP son robustas frente a J . Se observa su desdoblamiento.

Conclusiones y perspectivas

Desarrollo de métodos

Implementamos el método de campo medio dinámico DMFT (y sus extensiones multiorbital y de cluster) utilizando la renormalización con matriz densidad (DMRG) como simulador de la impureza. Esta técnica brinda una poderosa herramienta para estudiar los sistemas correlacionados, capaces de tratar adecuadamente problemas interactuantes complejos (por ejemplo el cluster de 4 sitios interactuantes). Las funciones espectrales se obtienen en el eje real y con esto muestran una estructura mucho más rica al alejarnos del nivel de Fermi, que los métodos tradicionales para función respuesta en el eje imaginario. Todas las escalas de energía son tratadas con igual precisión, superando en este aspecto a métodos en el eje real como el de renormalización numérica NRG. No tenemos problemas de continuación analítica desde el eje imaginario, ni de signo fermiónico como los métodos basados en Monte Carlo cuántico y podemos hacer cálculos directamente a temperatura cero. Por todo lo anterior, la técnica desarrollada en esta tesis es una de las más adecuadas y confiable para el cálculo de estructura electrónica a temperatura cero de sistemas correlacionados.

Para tratar eficientemente el problema de impureza, en el DMRG fue importante usar la representación de estrella (Figura 3.3) y la separación en espín.

Desarrollamos tres softwares de código abierto y de uso general. El primero (<https://sourceforge.net/projects/ed-sym>), implementa la Diagonalización Exacta para encontrar el estado fundamental, todos los autoestados, o la respuesta dinámica de un hamiltoniano fermiónico y permite el uso de simetrías y teoría de grupos. El segundo (<https://sourceforge.net/projects/dmrg-qc>), implementa el DMRG para hallar el estado fundamental y la respuesta dinámica de un hamiltoniano general con interacción de dos fermiones. El tercero (<https://sourceforge.net/projects/dmft-dmrg>), implementa al DMFT generalizado a una súper-red (como propusimos en el Capítulo 3) de forma que puede tratar con problemas multiorbital o de cluster, ingresándole solamente el hamiltoniano local y la función de Green no interactuante de la súper-red. Cada uno de estos software presenta, por supuesto, las limitaciones propias del método que implementan. Con ellos se pueden reproducir los cálculos presentados en esta tesis.

Cabe resaltar que son códigos de fácil lectura, reutilización y extensión.

Hemos ilustrado la versatilidad del método al lidiar con varios modelos paradigmáticos, diversos parámetros y redes cristalinas. Preparamos el camino para tratar impurezas efectivas complejas como las que aparecen al hacer cálculos en materiales concretos usando teoría de la funcional densidad (DFT) combinado con DMFT, también fenómenos disímiles como átomos adsorbidos, átomos fríos en redes ópticas y sistemas nanoscópicos como arreglos de puntos cuánticos.

Física de sistemas correlacionados

Modelo de Hubbard de una banda

Para el modelo de Hubbard de una banda en la red cuadrada, obtuvimos la transición de Mott y el efecto del potencial químico sobre la densidad de estados en un metal y en un aislante. Extendimos el DMFT a clusters (conglomerados) de 2 y 4 sitios, logrando resolver el espectro en frecuencia real de la impureza efectiva con baños más grandes que los reportados en la literatura, reduciendo con esto el efecto de tamaño finito en la discretización de la hibridización DMFT y dando la posibilidad de estudiar la densidad de estados resuelta en momentos (densidad espectral). Las correlaciones espaciales (no incluidas en el DMFT de 1 sitio) son importantes y provocan cambios en el U crítico de Mott, entre otros efectos. Con el cluster DMFT de 4 sitios, reproducimos resultados obtenidos para el modelo de cupratos de [62], en particular la forma de las bandas de Hubbard, posición y tamaño del gap de Mott e indicios de la formación de pseudogap en la energía Fermi. Queda como perspectiva extender el estudio de este modelo a la fase superconductora, y reproducir la propuesta reciente en [66] sobre la participación de fermiones escondidos en el mecanismo de superconductividad y en la formación del pseudogap en fase normal. Uno de los autores de ese trabajo nos propuso estudiar cluster más grande para ver la robustez de estos fermiones escondidos.

Modelos tipo Hubbard de dos bandas

Hubbard hibridizado. Caracterizamos la influencia de los distintos parámetros en el modelo de Hubbard de dos bandas, con interacción U intraorbital solamente, en la red cuadrada en presencia de campo cristalino y de hibridización interorbital (t') entre primeros vecinos. Encontramos que dicha hibridización siempre lleva a una densidad de estados finita en la energía de Fermi en los dos orbitales cuando al menos una de las bandas es metálica. Cuando los parámetros son tales que el potencial químico está en la banda de Hubbard del orbital 1 y entre las bandas de Hubbard del orbital 2, en este último aparece un pico de cuasipartícula en el nivel de Fermi, que se refuerza con t' , y cuyo peso decae exponencialmente con la interacción U . Este efecto es similar a la

física del modelo de Kondo de una impureza con un baño de electrones. En este caso la banda 1 hace las veces de «baño» mientras el orbital 2 hace de «impureza». Notar la diferencia de este resultado con la transición de Mott donde el peso del pico coherente metálico se anula en algún valor crítico de U . El comportamiento tipo Kondo observado coincide con lo obtenido en [86] a temperatura cero, donde se estudió el efecto de una banda conductora sobre la transición de Mott de los electrones f , relevante para algunos compuestos de cerio.

Hubbard-Hund. Estudiamos un modelo de dos bandas iguales en la red cuadrada con interacción local $\sim Un_i^2 - Js_i^2$, invariante rotacional, y que incluye el intercambio de Hund J en su forma más simple. Caracterizamos la transición de Mott al aumentar U para varios valores de J . Calculamos el peso de quasipartícula y obtuvimos que, para $J \neq 0$, la transición de Mott es de primer orden como función de U y es de segundo orden para $J = 0$. Observamos además la transición metal-aislante al aumentar J con U fijo (transición de Hund). Estos resultados concuerdan con los obtenidos por colaboradores usando bosones esclavos y también Monte Carlo cuántico.

Kanamori-Hubbard. Estudiamos el modelo de Kanamori-Hubbard de dos bandas iguales en la red de Bethe, con interacción intra (inter) orbital U (U_{12}) e intercambio de Hund J . Primeramente fijamos $J = 0$. Obtuvimos que para $U_{12} = 0,2U$ y varios U , la densidad de estados es prácticamente igual que la obtenida para el problema de una banda, indicando que las bandas se comportan como desacopladas. Por otro lado, cuando $U_{12} = 0,8U$ ó $U_{12} = 0,9U$ la densidad de estados presenta una estructura de 3 picos en la vecindad de la energía de Fermi, además de las bandas de Hubbard. Dicha estructura central desaparece con la transición de Mott y no está presente en los casos $U_{12} = 0,2U$ ni $U_{12} = U$. Los dos picos secundarios en la estructura central están a una distancia $U - U_{12}$ del pico metálico. Varios de estos resultados se explican analizando la estructura de niveles del límite atómico. La estructura de 3 picos es producto de las quasipartículas hueco-doblón interorbital que veremos más abajo. Los resultados además sugieren que la transición de Mott es de primer orden cuando hay estructura central de 3 picos y es continua en los demás casos.

También estudiamos el caso de anchos de banda diferentes. Obtuvimos una transición de Mott selectiva en orbital al aumentar U . Resultados preliminares indican que la fase selectiva es estable frente a la hibridización interorbital en algunos casos como cuando $J = U/4$, $U_{12} = U - 2J$ (coincidiendo con el trabajo [73]) y no es estable si $U_{12} \lesssim U$.

Las quasipartículas. Encontramos un mecanismo novedoso que causa atracción a partir de la repulsión de Coulomb y que lleva al surgimiento de estados de quasipartícula

robustos. Estos consisten en estados enlazados de hueco-doblón interbanda a energía $\Delta = U - U_{12}$, dentro de la brecha de energía, los cuales están correlacionados con el pico metálico en la otra banda. En particular, cuando una banda es metálica y la otra aislante (fase selectiva), los picos de estas cuasipartículas pueden aparecer en la zona interior del gap aislante.

Otra consecuencia importante es que, en el caso $U = U_{12}$ ($\Delta = 0$), los picos de cuasipartícula se encuentran en el nivel de Fermi y habrá una transición de Mott simultánea y continua (no selectiva orbital) al aumentar U , sin importar la proporción entre los anchos de bandas. Esto significa que el mecanismo (tipo Kondo) que causa el pico metálico en la banda más ancha está acompañado de un mecanismo (hueco-doblón interbanda) que genera un pico en la energía de Fermi de la banda angosta. Para una relación 1/50 entre los anchos de banda, mostramos que ambos picos son de distinta naturaleza. También implica que podría haber un transición aislante a metal en la banda angosta provocada por la proximidad de una banda metálica (se incrementa U_{12} hacia U) sin que haya hibridización entre ellas.

Los resultados presentados aquí podrían explicar características interesantes dentro del gap observadas en materiales donde este modelo es aplicable, por ejemplo, en mediciones de conductividad óptica o espectro de fotoemisión. El mecanismo debe tenerse en cuenta para modelos relacionados, como la transición de Mott selectiva en espacio de momento y la formación de pseudogap, válido para superconductores basados en cupratos [87]. Estas cuasipartículas deberían observarse también en experimentos con átomos fríos [88].

Las cuasipartículas son robustas frente al dopaje, y a la presencia de acoplamiento de Hund J entre bandas, donde aparece una subestructura por el desdoblamiento en espín. Deberían ser robustas a la hibridización interorbital, al campo cristalino, y al tipo de red.

Conclusión general

Implementamos un tratamiento de cálculo numérico común y desarrollamos algoritmos y programas de avanzada para los modelos más representativos de materiales correlacionados. Estas técnicas numéricas forman parte del estado del arte de la simulación de sistemas correlacionados. Con ellas estudiamos algunos modelos paradigmáticos obteniendo resultados novedosos. En particular encontramos y caracterizamos las cuasipartículas hueco-doblón interbanda. Como legado de esta tesis se abre la posibilidad de continuar con el estudio de otros sistemas más complejos y de pasar a la aplicación a modelos realistas de materiales al incluir información obtenida con técnicas de primero principios.

Apéndice A

Apéndices

A.1. Red de Bethe

La red de Bethe es aquella en la que cada sitio tiene z vecinos y que no tiene ciclos (grafo en forma de árbol). Se usa como modelo de red simplificada por la facilidad que brinda en algunos cálculos su estructura de árbol. De particular interés es el límite $z \rightarrow \infty$ con $t = t'/\sqrt{z}$ finito, donde t' es el hopping a primeros vecinos. Este caso corresponde a dimensión infinita y el campo medio dinámico (DMFT) es exacto [1]. Con esto se convierte en el modelo de red predilecto para estudiar los efectos dinámicos de correlación. La función de Green no interactuante viene dada por

$$G_0(\omega) = 2 \left[\omega + \sqrt{\omega^2 - 4t^2} \right]^{-1},$$

con la conocida forma semicircular de radio $2t$ de la densidad de estados $(-\frac{1}{\pi}\Im[G_0])$.

En el caso de varios orbitales por sitio, lo anterior se extiende a magnitudes matriciales obteniéndose:

$$G_0(\omega) = 2 \left[\omega \mathbf{1} + \sqrt{(\omega \mathbf{1})^2 - 4B^2} \right]^{-1},$$

donde B es la matriz de hopping a primeros vecinos.

A.2. Operadores complementarios usados en la tesis

Siguiendo con la idea expuesta en [Subsección 2.7.3](#), presentamos la formulación de operadores complementarios usada en esta tesis para una interacción de dos partículas. Sea la interacción entre fermiones:

$$\hat{V} = \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l,$$

por la reglas de anticonmutación, tenemos

$$\hat{V} = \sum_{i < j, l < k} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l, \text{ donde } W_{ijkl} = V_{ijkl} - V_{jikl} - V_{ijlk} + V_{jilk}.$$

Para simplificar la notación fijemos que $W_{ijkl} = 0$ si no se cumple $i < j$ y $l < k$. A continuación consideramos las posibles particiones de los índices en un sistema formado por dos bloques (bloque 1 y bloque 2, pensando en su uso en el DMRG, por ejemplo).

Partición 3×1 : esto es, tres índices en el bloque 1 y un índice en el bloque 2. En el bloque 2 pueden quedar c_k ó c_j^\dagger , pero ambas expresiones están relacionados por el hermítico conjugado (h.c.), por tanto,

$$\hat{V} = - \underbrace{\sum_{ijkl} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l}_{d_k^\dagger} c_k = \sum_k d_k^\dagger \times c_k + \text{h.c.} \quad (\text{A.1})$$

Aquí aparece un nuevo operador complementario (cambiando k por l):

$$d_l^\dagger = \sum_{ijk} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k.$$

Partición 1×3 . Básicamente es el resultado anterior cambiando el orden de los bloques:

$$\hat{V} = - \sum_k c_k \times d_k^\dagger + \text{h.c.} \quad (\text{A.2})$$

Partición 2×2 . Se presentan dos casos:

(a) con movimiento de dos electrones:

$$\hat{V} = \underbrace{\sum_{ijkl} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l}_{d_{kl}^\dagger} = \sum_{lk} d_{kl}^\dagger c_{kl} + \text{h.c.} = \sum_{ij} c_{ji}^\dagger d_{ji} + \text{h.c.} \quad (\text{A.3})$$

donde se introdujeron los operadores

$$d_{kl}^\dagger = \sum_{ij} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger, \quad d_{ji} = \left(d_{ji}^\dagger \right)^\dagger, \quad c_{kl} = c_k c_l, \quad c_{ji}^\dagger = \left(c_{ji}^\dagger \right)^\dagger.$$

(b) sin movimiento de carga:

$$\hat{V} = \underbrace{\sum_{ijkl} W_{ijkl} c_i^\dagger c_l}_{\bar{n}_{jk}} c_j^\dagger c_k = \sum_{jk} \bar{n}_{jk} \times n_{jk} = \sum_{il} n_{il} \times \bar{n}_{il}, \text{ donde } n_{jk} = c_j^\dagger c_k. \quad (\text{A.4})$$

Operadores complementarios. A su vez, las fórmulas de construcción para los nuevos operadores introducidos son:

$$\begin{aligned}
 d_l^\dagger &= \sum_{ijk} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k = \sum_k d_{kl}^\dagger \times c_k + \sum_k c_k \times d_{kl}^\dagger + \sum_i c_i^\dagger \times \bar{n}_{il} + \sum_j \bar{n}_{jl} \times c_j^\dagger, \\
 d_{kl}^\dagger &= \underbrace{\sum_{ij} W_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger}_{d_{jkl}^\dagger} = \sum_j d_{jkl}^\dagger \times c_j^\dagger = - \sum_i c_i^\dagger \times d_{ikl}^\dagger, \\
 \bar{n}_{jk} &= \sum_{il} W_{ijkl} c_i^\dagger c_l = \sum_l d_{jkl}^\dagger \times c_l - \sum_l c_l \times d_{jkl}^\dagger = \sum_i c_i^\dagger \times d_{kji} - \sum_i d_{kji} \times c_i.
 \end{aligned}$$

Comentarios. Finalmente, el \hat{V} se construye sumando las contribuciones de (Ecuación A.1), (Ecuación A.2), (Ecuación A.3), (Ecuación A.4). Estas dos últimas, tienen mayor cantidad de términos, del orden de $\sim L^2$, y por tanto dominan el costo del cálculo. Cada vez que aparecen dos formas de calcular lo mismo, es porque conviene usar una o la otra dependiendo de si el bloque 1 tiene más sitios que el bloque 2.

Bibliografía

- [1] Autumn School on Correlated Electrons, Jülich (Germany), 15 Sep 2014 - 19 Sep 2014. DMFT at 25: Infinite Dimensions, URL <http://juser.fz-juelich.de/record/155829>. vii, vii, 4, 8, 39, 40, 87
- [2] Lu, Y., Höppner, M., Gunnarsson, O., Haverkort, M. W. Efficient real-frequency solver for dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, **90**, 085102, Aug 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.085102>. vii, 45
- [3] Maier, T., Jarrell, M., Pruschke, T., Hettler, M. H. Quantum cluster theories. *Rev. of Mod. Phys.*, **77** (3), 1027, 2005. vii, 39, 50
- [4] Hallberg, K., García, D., Cornaglia, P. S., Facio, J. I., Núñez-Fernández, Y. State-of-the-art techniques for calculating spectral functions in models for correlated materials. *EPL (Europhysics Letters)*, **112** (1), 17001, 2015. ix, 5, 44, 61, 62, 63
- [5] Facio, J. I., Vildosola, V., García, D. J., Cornaglia, P. S. On the nature of the Mott transition in multiorbital systems. *Phys. Rev. B*, **95**, 085119, Feb 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.085119>. ix, 62, 68
- [6] Hohenberg, P., Kohn, W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, **136**, B864–B871, Nov 1964. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>. 1
- [7] Jones, R. O., Gunnarsson, O. The density functional formalism, its applications and prospects. *Rev. Mod. Phys.*, **61**, 689–746, Jul 1989. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.61.689>. 1
- [8] Kotliar, G., Vollhardt, D. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, **57** (3), 53–60, 2004. 1, 2, 4, 39
- [9] Imada, M., Fujimori, A., Tokura, Y. Metal-insulator transitions. *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 1039–1263, Oct 1998. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.1039>. 2

- [10] Mott, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, **62** (7), 416, 1949. 2
- [11] Georges, A., de' Medici, L., Mravlje, J. Strong Correlations from Hund's Coupling. *Ann. Rev. of Cond. Matt. Phys.*, **4** (1), 137–178, 2013. URL <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-020911-125045>. 3, 8
- [12] Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W., Rozenberg, M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, **68**, 13–125, Jan 1996. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.68.13>. 4, 39, 79
- [13] Imada, M., Miyake, T. Electronic structure calculation by first principles for strongly correlated electron systems. *J. of the Phys. Soc. of Japan*, **79** (11), 112001, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.79.112001>. 4
- [14] Rozenberg, M. J., Kotliar, G., Zhang, X. Y. Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. ii. *Phys. Rev. B*, **49**, 10181–10193, Apr 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.10181>. 5
- [15] Caffarel, M., Krauth, W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 1545–1548, Mar 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.72.1545>. 5
- [16] Hirsch, J. E., Fye, R. M. Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals. *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 2521–2524, Jun 1986. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.2521>. 5
- [17] Pruschke, T., Cox, D. L., Jarrell, M. Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B*, **47**, 3553–3565, Feb 1993. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.3553>. 5
- [18] Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 773–840, Oct 1975. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>. 5
- [19] Loh, E. Y., Gubernatis, J. E., Scalettar, R. T., White, S. R., Scalapino, D. J., Sugar, R. L. Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems. *Phys. Rev. B*, **41**, 9301–9307, May 1990. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.9301>. 5

- [20] Žitko, R., Pruschke, T. Energy resolution and discretization artifacts in the numerical renormalization group. *Phys. Rev. B*, **79**, 085106, Feb 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.085106>. 5
- [21] García, D. J., Hallberg, K., Rozenberg, M. J. Dynamical mean field theory with the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 246403, Dec 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.246403>. 5, 44, 46
- [22] García, D. J., Miranda, E., Hallberg, K., Rozenberg, M. J. Mott transition in the Hubbard model away from particle-hole symmetry. *Phys. Rev. B*, **75**, 121102, Mar 2007. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.121102>.
- [23] White, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 2863–2866, Nov 1992. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>. 27
- [24] White, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, **48**, 10345–10356, Oct 1993. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>. 27
- [25] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, **326** (1), 96–192, 2011. 5, 11, 27, 30
- [26] Gull, E., Millis, A. J., Lichtenstein, A. I., Rubtsov, A. N., Troyer, M., Werner, P. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 349–404, May 2011. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.83.349>. 5
- [27] Drchal, V., Janiš, V., Kudrnovský, J., Oudovenko, V., Dai, X., Haule, K., *et al.* Dynamical correlations in multiorbital Hubbard models: fluctuation exchange approximations. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **17** (1), 61, 2004. 5
- [28] Holzner, A., Weichselbaum, A., von Delft, J. Matrix product state approach for a two-lead multilevel Anderson impurity model. *Phys. Rev. B*, **81** (12), 125126, 2010. 6, 44
- [29] Wolf, F. A., Go, A., McCulloch, I. P., Millis, A. J., Schollwöck, U. Imaginary-time matrix product state impurity solver for dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. X*, **5**, 041032, Nov 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.5.041032>.
- [30] Núñez-Fernández, Y., Hallberg, K. An efficient impurity-solver for the dynamical mean field theory algorithm. *Papers in Physics*, (009), 2017. URL <http://www.papersinphysics.org/papersinphysics/article/view/388>. 6, 44, 47

- [31] Helgaker, T., Jorgensen, P., Olsen, J. Molecular electronic-structure theory. John Wiley & Sons, 2014. 7
- [32] Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands. En: Proceedings of the Royal Society of London A: mathematical, physical and engineering sciences, tomo 276, págs. 238–257. The Royal Society, 1963. 7
- [33] Emery, V. J. Theory of high- t_c superconductivity in oxides. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2794–2797, Jun 1987. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.58.2794>. 7
- [34] Zhang, F. C., Rice, T. M. Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides. *Phys. Rev. B*, **37**, 3759–3761, Mar 1988. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.3759>. 47
- [35] Anderson, P. W. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, **235** (4793), 1196–1198, 1987. 7, 47
- [36] Lieb, E. H., Wu, F. Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, **20** (25), 1445, 1968. 7
- [37] Tinkham, M. Group theory and Quantum Mechanics. Dover Publications, Inc., 2003. 8, 22
- [38] Weiße, A., Fehske, H. Computational many-particle physics. Exact diagonalization techniques. Springer, 2008. 11, 16, 23
- [39] Dagotto, E. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 763–840, Jul 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.66.763>. 11, 17
- [40] Hallberg, K. A. New trends in density matrix renormalization. *Advances in Physics*, **55** (5-6), 477–526, 2006. 11, 27
- [41] contributors, W. Invertible matrix — wikipedia, the free encyclopedia, 2018. URL https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Invertible_matrix&oldid=820093394, [Online; accessed 7-February-2018]. 15
- [42] Mahan, G. D. Many-particle physics. Springer Science & Business Media, 2013. 15
- [43] Gagliano, E. R., Balseiro, C. A. Dynamical properties of quantum many-body systems at zero temperature. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 2999–3002, Dec 1987. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.2999>. 17

- [44] Ramasesha, S., Pati, S., Krishnamurthy, H. R., Shuai, Z., Brédas, J. L. Low-lying electronic excitations and nonlinear optic properties of polymers via symmetrized density matrix renormalization group method. *Synthetic Metals*, **85**, 1019–1022, 1997. URL [https://doi.org/10.1016/S0379-6779\(97\)80136-1](https://doi.org/10.1016/S0379-6779(97)80136-1). 17, 33
- [45] Weiße, A., Wellein, G., Alvermann, A., Fehske, H. The kernel polynomial method. *Rev. Mod. Phys.*, **78**, 275–306, Mar 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.275>. 17
- [46] Saad, Y. Iterative methods for sparse linear systems, tomo 82. SIAM, 2003. 18
- [47] Kühner, T. D., White, S. R. Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, **60**, 335–343, Jul 1999. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.335>. 18, 33
- [48] Sanderson, C., Curtin, R. Armadillo: a template-based c++ library for linear algebra. *Journal of Open Source Software*, 2016. 20, 34
- [49] contributors, W. Stirling’s approximation — wikipedia, the free encyclopedia, 2018. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Stirling's_approximation, [Online; accessed 7-February-2018]. 21
- [50] Peschel, I., Wang, X., Kaulke, M., Hallberg, K. (eds.) Density-Matrix Renormalization - A New Numerical Method in Physics, tomo 528. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999. 27
- [51] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group. *Rev. of Mod. Phys.*, **77** (1), 259, 2005. 27
- [52] Chan, G. K.-L., Sharma, S. The density matrix renormalization group in quantum chemistry. *Ann. Rev. of Phys. Chem.*, **62**, 465–481, 2011. 27
- [53] Chan, G. K.-L., Keselman, A., Nakatani, N., Li, Z., White, S. R. Matrix product operators, matrix product states, and ab initio density matrix renormalization group algorithms. *The Journal of Chemical Physics*, **145** (1), 014102, 2016. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4955108>. 28, 31
- [54] Bridgeman, J. C., Chubb, C. T. Hand-waving and interpretive dance: An introductory course on tensor networks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **50** (22), 223001, 2017. 27
- [55] contributors, W. Gramian matrix — wikipedia, the free encyclopedia, 2017. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Gramian_matrix, [Online; accessed 7-February-2018]. 28

- [56] Eisert, J., Cramer, M., Plenio, M. B. Colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 277–306, Feb 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.277>. 30
- [57] Ronca, E., Li, Z., Jimenez-Hoyos, C. A., Chan, G. K.-L. Time-step targeting time-dependent and dynamical density matrix renormalization group algorithms with ab initio Hamiltonians. *Journal of Chemical Theory and Computation*, **13** (11), 5560–5571, 2017. 31
- [58] Hallberg, K. A. Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, **52**, R9827–R9830, Oct 1995. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.R9827>. 34
- [59] White, S. R., Feiguin, A. E. Real-time evolution using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 076401, Aug 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.076401>. 34
- [60] Wolf, F. A., Justiniano, J. A., McCulloch, I. P., Schollwöck, U. Spectral functions and time evolution from the Chebyshev recursion. *Phys. Rev. B*, **91**, 115144, Mar 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.115144>. 34
- [61] Kotliar, G., Savrasov, S. Y., Haule, K., Oudovenko, V. S., Parcollet, O., Marianetti, C. A. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Rev. Mod. Phys.*, **78**, 865–951, Aug 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.865>. 39
- [62] Sakai, S., Motome, Y., Imada, M. Doped high- T_c cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of the electronic Green’s function. *Phys. Rev. B*, **82**, 134505, Oct 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.134505>. 43, 47, 84
- [63] Karski, M., Raas, C., Uhrig, G. S. Electron spectra close to a metal-to-insulator transition. *Phys. Rev. B*, **72** (11), 113110, 2005. 44
- [64] Peters, R. Spectral functions for single-and multi-impurity models using density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, **84** (7), 075139, 2011. 44
- [65] Zhang, Y., Imada, M. Pseudogap and Mott Transition Studied by Cellular Dynamical Mean Field Theory. *Phys. Rev. B*, **76**, 045108, 2007. 44, 52
- [66] Sakai, S., Civelli, M., Imada, M. Hidden Fermionic Excitation Boosting High-Temperature Superconductivity in Cuprates. *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 057003, Feb 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.057003>. 47, 84

- [67] Núñez-Fernández, Y., Hallberg, K. Solving the multi-site and multi-orbital dynamical mean field theory using density matrix renormalization. *Aceptado en Frontiers in Physics, arXiv preprint arXiv:1711.08745*, 2017. [47](#)
- [68] Liebsch, A., Ishida, H., Merino, J. Multisite versus multiorbital Coulomb correlations studied within finite-temperature exact diagonalization dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, **78** (16), 165123, 2008. [51](#)
- [69] Imada, M., Miyake, T. Electronic structure calculation by first principles for strongly correlated electron systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, **79** (11), 112001, 2010. [52](#)
- [70] Núñez-Fernández, Y., Kotliar, G., Hallberg, K. Emergent low-energy bound states in the two-orbital hubbard model. *Arbitraje en PRL desde oct/2017, arXiv preprint arXiv:1710.08792*, 2017. [55](#)
- [71] Núñez-Fernández, Y., Hallberg, K. Metal-insulator transition in the hybridized two-orbital hubbard model revisited. *Enviado a Journal of Physics: Conference Series, arXiv preprint arXiv:1712.05025*, 2017. [56](#)
- [72] Núñez-Fernández, Y., García, D., Hallberg, K. The two orbital Hubbard model in a square lattice: a DMFT+ DMRG approach. *En: Journal of Physics: Conference Series*, tomo 568, pág. 042009. IOP Publishing, 2014. [61](#)
- [73] Winograd, E. A., de' Medici, L. Hybridizing localized and itinerant electrons: A recipe for pseudogaps. *Phys. Rev. B*, **89**, 085127, Feb 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.085127>. [69](#), [70](#), [85](#)
- [74] Koga, A., Kawakami, N., Rice, T., Sigrist, M. Mott transitions in the multi-orbital systems. *Physica B: Condensed Matter*, **359**, 1366–1368, 2005. [69](#), [70](#), [79](#)
- [75] Lee, S.-S. B., von Delft, J., Weichselbaum, A. Doublon-Holon Origin of the Subpeaks at the Hubbard Band Edges. *Phys. Rev. Lett.*, **119**, 236402, Dec 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.236402>. [74](#)
- [76] Rincón, J., Dagotto, E., Feiguin, A. E. Photoinduced Hund excitons in the breakdown of a two-orbital Mott insulator. *arXiv preprint arXiv:1706.10247*, 2017. [74](#)
- [77] Lenarčič, Z., Prelovšek, P. Charge recombination in undoped cuprates. *Phys. Rev. B*, **90**, 235136, Dec 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.235136>. [74](#)

- [78] Blümer, N., Gorelik, E. V. Mott transitions in the half-filled $SU(2M)$ symmetric Hubbard model. *Phys. Rev. B*, **87**, 085115, Feb 2013. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.085115>. 75
- [79] Liebsch, A. Mott Transitions in Multiorbital Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 226401, Nov 2003. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.226401>. 75
- [80] Koga, A., Kawakami, N., Rice, T. M., Sigrist, M. Orbital-Selective Mott Transitions in the Degenerate Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 216402, May 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.216402>.
- [81] Dao, T.-L., Ferrero, M., Cornaglia, P. S., Capone, M. Mott transition of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices. *Phys. Rev. A*, **85**, 013606, Jan 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.85.013606>. 75
- [82] de' Medici, L., Georges, A., Biermann, S. Orbital-selective Mott transition in multiband systems: Slave-spin representation and dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, **72**, 205124, Nov 2005. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.205124>. 75
- [83] Ferrero, M., Becca, F., Fabrizio, M., Capone, M. Dynamical behavior across the Mott transition of two bands with different bandwidths. *Phys. Rev. B*, **72**, 205126, Nov 2005. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.205126>. 75
- [84] Hewson, A. C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1993. 77, 78
- [85] de' Medici, L. Hund's coupling and its key role in tuning multiorbital correlations. *Phys. Rev. B*, **83**, 205112, May 2011. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.205112>. 80
- [86] de' Medici, L., Georges, A., Kotliar, G., Biermann, S. Mott Transition and Kondo Screening in f -Electron Metals. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 066402, Aug 2005. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.066402>. 85
- [87] Ferrero, M., Cornaglia, P. S., De Leo, L., Parcollet, O., Kotliar, G., Georges, A. Pseudogap opening and formation of Fermi arcs as an orbital-selective Mott transition in momentum space. *Phys. Rev. B*, **80**, 064501, Aug 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.064501>. 86
- [88] Hofrichter, C., Riegger, L., Scazza, F., Höfer, M., Fernandes, D. R., Bloch, I., *et al.* Direct Probing of the Mott Crossover in the $SU(N)$ Fermi-Hubbard Model.

Phys. Rev. X, **6**, 021030, Jun 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.021030>. 86

Publicaciones asociadas

1. **Y. Núñez-Fernández**, D. García, and K. Hallberg. "The two orbital Hubbard model in a square lattice: a DMFT + DMRG approach", J. Phys.: Conf. Ser. 568, 042009 (2014). *En esta tesis*: [Sección 5.3](#).
2. K. Hallberg, D. J. García, Pablo S. Cornaglia, Jorge I. Facio and **Y. Núñez-Fernández**, "State-of-the-art techniques for calculating spectral functions in models for correlated materials", EPL Perspectives, 112 17001 (2015). *En esta tesis*: [Sección 3.2](#), [Sección 5.3](#).
3. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg. "An efficient impurity-solver for the Dynamical Mean Field Theory Algorithm", Papers in Physics, 090005 (2017). *En esta tesis*: [Subsección 4.2.2](#).
4. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg. "Solving the multi-site and multi-orbital Dynamical Mean Field Theory using Density Matrix Renormalization", arXiv:1711.08745, aceptado en Frontiers in Physics (www.frontiersin.org). *En esta tesis*: [Sección 3.2](#), [Sección 4.3](#), [Subsección 5.4.3](#).
5. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg, G. Kotliar. "Emergent low-energy bound states in the two-orbital Hubbard model", arXiv:1710.08792, enviado a PRL, octubre 2017. *En esta tesis*: [Sección 5.5](#).
6. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg. "Metal-insulator transition in the hybridized two-orbital Hubbard model revisited", arXiv:1712.05025, enviado a Journal of Physics: Conference Series. *En esta tesis*: [Sección 5.2](#).
7. J. Facio, P. Cornaglia, **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg. "In-gap structure in Hubbard-like models" (en preparación). *En esta tesis*: [Subsección 5.4.2](#).
8. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg, G. Kotliar. "Physical properties of the interband holon-doublon quasiparticles in the two-orbital Hubbard model" (en preparación). *En esta tesis*: [Subsección 5.5.2](#).

9. **Y. Núñez-Fernández**, K. Hallberg, M. Imada. "Cluster-size dependence of the pseudogap and superconducting states of the two-dimensional Hubbard model" (en preparación, resultados preliminares en esta tesis). *En esta tesis*: [Sección 4.3](#).

Software (open-source)

1. ED-SYM (<https://sourceforge.net/projects/ed-sym>), implementa la Diagonalización Exacta para encontrar el estado fundamental, todos los autoestados, o la respuesta dinámica de un hamiltoniano multielectrónico cualquiera y permite el uso de simetrías y teoría de grupos. *En esta tesis*: Capítulo 2.
2. DMRG-QC (<https://sourceforge.net/projects/dmrg-qc>), implementa el DMRG para hallar el estado fundamental y la respuesta dinámica de un hamiltoniano general con interacción de dos partículas. *En esta tesis*: Capítulo 2.
3. DMFT-DMRG (<https://sourceforge.net/projects/dmft-dmrg>), implementa al DMFT generalizado a una súper-red (ver Capítulo 3). Puede tratar con problemas multiorbital o de cluster. *En esta tesis*: Capítulo 3.

Agradecimientos

Quisiera empezar por agradecer al CONICET, a Argentina, por esta gran oportunidad de estudiar en el Instituto Balseiro, Universidad de Cuyo, y al Centro Atómico Bariloche (CNEA), por poder compartir con tan buenos investigadores y profesores.

Al Grupo de Sólidos por recibirme y por todo el ambiente de aprendizaje y debate. A las distintas instituciones de ciencia (CONICET, ANPCyT, ICAM, NSF) que facilitaron mi participación en escuelas, eventos científicos y el acceso a centros de cómputo; en particular, la escuela sobre DMFT (2014, Alemania), sobre DMRG (2015, Brasil) y el acceso al XSEDE (EUA). A la biblioteca Leo Falicov.

Siento un agradecimiento especial hacia mi directora Karen, que ha sido la fuente inagotable de entusiasmo en esta investigación. Por su sabiduría, instinto, por su apoyo y calidez humana. Por introducirme en estos temas de física tan lindos, compartir cada avance que fuimos logrando y ocuparse también de mi formación.

A los profes de las materias DFT, Sólidos I, Teoría de Muchos Cuerpos, CUDA, Teoría de Grupos por todo lo que aprendí, en especial al profesor Aligia que me enseñó varias de las herramientas fundamentales para esta tesis y que siempre está disponible para explicar cualquier duda, también por su excelencia como revisor de la tesis.

A Daniel García, por toda su ayuda en los primeros años de doctorado, por sus programas y scripts que hacían de todo, y la paciencia de explicarlos. A Pablo Cornaglia, por brindarme sus códigos de diagonalización exacta y por los debates de física junto a Jorge Facio. A Gabi Kotliar, por sus interesantes conversaciones y propuestas, y sus preguntas reveladoras. También a Blas Alascio, Marcelo Rozenberg y Masa Imada. A Tavo por su importante ayuda con las corridas.

No puedo dejar de mencionar a mi entrañable «compañero de oficina» Daniel Miravet.

En lo personal, me siento muy afortunado por todos los que me quieren, porque sin ellos la mayoría de las cosas no tendrían sentido. A mi ciic. A mi familia. A mis amigos.

Seguramente no menciono a muchos que me ayudaron. A veces hasta un pequeño detalle cuenta. A todos, gracias.

